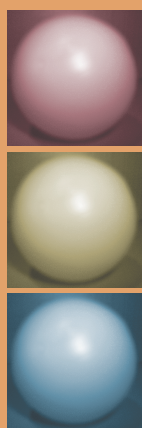


A TARTALOMBÓL:

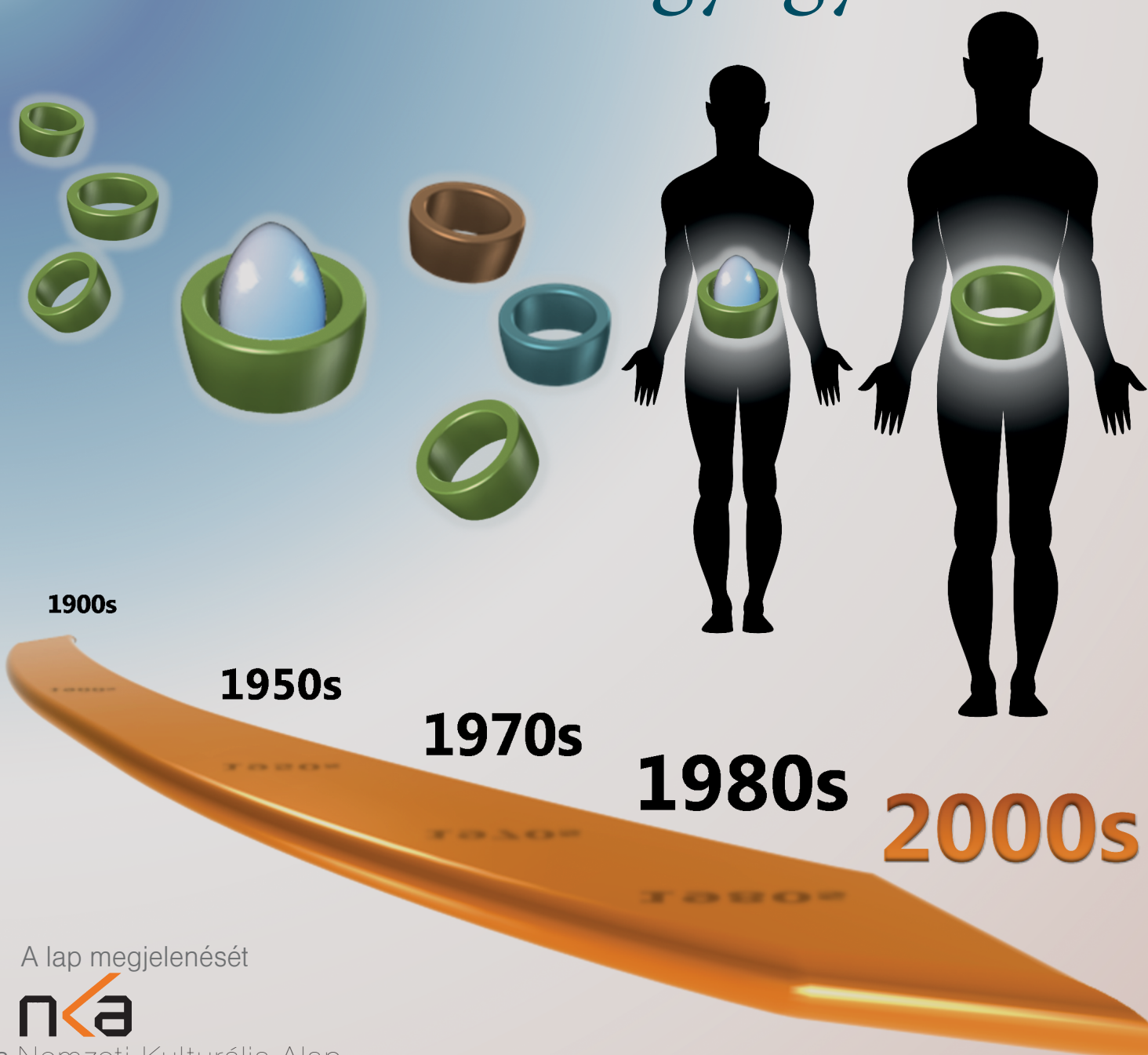
- Szent-Györgyi Albert előadás-sorozat
- Szerveződő kémiai rendszerek számítása
- Ködpiszkáló – molekuláris rasszizmus
- Híresek és Kémikusok – Ferenc pápa



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ POLYÓIRATA • LXX. ÉVFOLYAM • 2015. MÁJUS • ÁRA: 850 FT

Ciklodextrinek a gyógyításban



A lap megjelenését

nka

a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja

Az inolab[®] műszercsalád: megbízható, pontos, biztos

INTELLIGENS

DIGITÁLIS

SZENZOROK



**Műszerek
hagyományos és
IDS elektródákkal**



AKTIVIT Kft.



Automata analizátorok, labor műszerek, analitikai eszközök
1145 Budapest, Pétervárad u. 14. Tel: (1)-470-0125, 221-7865.
Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu

PARAMÉTEREK:

pH

REDOX

ION

O₂

T

NTU

Σ

BOI

BIO

* pH * redox potenciál * ionszelektív mV * oldott oxigén * vezetőképesség
* hőmérséklet * zavarosság * BOI, * biogáz, * bonthatóság, * talajlégzés



EN ISO 9001



3 év garancia

PROFESSIONÁLIS MÉRÉSTECHNIKA

InoLab[®]





MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXX. évf., 5. szám, 2015. május



A Magyar Kémikusok Egyesületének
– a MTE SZJ tagjának –
tudományos ismeretterjesztő
folyóirata és hivatalos lapja

Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
JANÁKY CSABA, LENTE GÁBOR,
NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR,
ZÉKÁNY ANDRÁS

Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
[SZEKERES GÁBOR] örökös főszerkesztő,
ANTUS SÁNDOR, BECK MIHÁLY,
BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA,
HANCSÓK JENŐ, JANÁKY CSABA,
JUHÁSZ JENŐNÉ, KALÁSZ HUBA,
KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA,
KÖRTVÉLYESI ZSOLT,
KÖRTVÉLYESSY GYULA,
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,
RÁCZ LÁSZLÓ, SZABÓ ILONA,
TÖMPE PÉTER, ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az Egyesület tagjai és a megrendelők
A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS

Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883
Fax: 36-1-201-8056
Email: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete
Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA
Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.
Nyomás és kötés: Mester Nyomda
Felelős vezető: ANDERLE LAMBERT
Tel./fax: 36-1-455-5050

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank
10700024-24764207-51100005 sz.
számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 10 200 Ft
Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti
a Batthyány Kultur-Press Kft.,
H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.
1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,
1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-201-6883, fax: 36-1-201-8056,
e-mail: mkl@mke.org.hu

Aktuális számaink tartalma,
az összefoglalók és egyesületi híreink,
illetve archivált számaink honlapunkon
(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)



Mindig hasznos és élvezetes kézbe venni az immár hatodik éve megújult hazai kémikus orgánusot, amely következetesen színes, aktuális, friss, és kiválóan ötvözi a magas szakmai igényességű közleményeket az ismeretterjesztő vagy akár tudománypolitikai indíttatású írásokkal. Ez a sokszínűség a májusi számban is tetten érhető.

A tisztelt olvasó figyelmét két cikkre hívnám fel, amely látszólag különböző témát érint, mégis szorosan összekapcsolódik.

Mint gyógyszerkutatásban „nevelkedett” kémikus, megkülönböztetett érdeklődéssel olvastam és ajánlom Braun Tibor cikkét az artemizinin titkos múltjáról. A természeti népek orvoslásának vizsgálata, a „sámán gyógyszerkémia” (Shaman as scientist, Cox. P. A., 1995) hosszú múltra tekint vissza, és az elválasztástechnikai, illetve analitikai módszerek rohamos fejlődésével egyre vonzóbb kutatási stratégiává vált. A nagy sikerű film, a Medicine Man (1992) sztorija hasonlóságokat mutat a rákel- lenes szer, a taxol felfedezésével. A tradicionális kínai orvoslásban (TCM) használt növények vizsgálata talán éppen az artemizinin sikerén is felbuzdulva komoly reneszánszát éli. A proteomika, metabolomika módszerével elve nemcsak a biológiailag aktív hatóanyagokat vizsgálják, hanem a természetes moleku- lák szinergizmusát is, azaz, hogy a növény vagy kivonata azért is különösen hatásos, mert egyszerre több ponton támad, több komplementer jelátviteli útvonalat befolyásol. Amíg ez kétségtelenül igaz lehet, komoly veszélyeket hordoz a gyógyszeripar, illetve a gyógyítás számára. Azt a hamis látszatot kelti, hogy az egyetlen hatóanyagú, illetve egyetlen támadáspontú (elsősorban szintetikus) szereket el kell vetni és kizárólag a természetes forrásokhoz kell visszatérni.

Csupor Dezső cikkében pontosan erre a veszélyre hívja fel a figyelmet. Folytatja azt a többekkel együtt korábban elkezdett felvilágosító tevékenységet, amelyet a pár éve megjelent Száz kémiai mítosz (Akadé- miai Kiadó, 2011) és a <http://kodpiskalo.blog.hu/> világháló oldal fémjelez, ahonnan a széles nyilvános- ság útmutatót kaphat arra vonatkozóan, hogy felfedezze, milyen módszerekkel kívánnak „megetetni” ben- nünket a tudományosság látszatát keltve, illetve csúsztatásokkal és általánosításokkal eltántorítani a szintetikus gyógyszerek alkalmazásától. A valóságban, persze, a természeti eredetű és a szintetikus gyógy- szerelés egymást kiegészítve tudja feladatát betölteni.

E két kiragadott közlemény is jól tükrözi a Magyar Kémikusok Lapja törekvését a figyelemfelkeltés és szigorú tudományosság ötvöztetésére.

2015. május

Dormán György

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Szente Lajos: Ciklodextrinek. Nanoméretű konténerektől a terápiás eszközökig 150

Szöri Milán, Jójárt Balázs, Viskolcz Béla: Szerveződő kémiai rendszerek számítása 153

Szent-Györgyi Albert előadás-sorozat

Nyitrai László, Perczel András, Buday László: Molekuláris élettudományi előadás-sorozat az ELTE TTK és az MTA TTK közös szervezésében 158

Beszámoló

Nyitrai László Harald Schwalbe előadásáról (Understanding dynamic layers of cellular information transfer) 159

Gál Péter Gregers Rom Andersen előadásáról (Structural insight into the mechanism of complement activation through a hybrid approach of crystallography and small angle X-ray scattering) 160

OKTATÁS

Sok tehetség kiszorulhat a felsőoktatásból. Interjú **Lovász Lászlóval** 162

KITEKINTÉS

Lente Gábor: Hírek és Kémikusok. Ferenc pápa 164

Csupor Dezső: Ködpiskáló. Molekuláris rasszizmus, szintetikumallergia 165

Magyarország folyói helyrejönnek a vörösiszap-katasztrófa után 166

Braun Tibor: Mao elnök által kezdeményezett maláriaellenes gyógyszerkutatás. Az artemizinin felfedezése 167

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

Vegyészkalendárium (**Pap József Sándor** rovata) 171

VEGYÉSZLELETEK

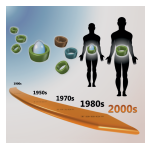
Lente Gábor rovata 172

EGYESÜLETI ÉLET

174

A HÓNAP HÍREI

175



Címlap:
Ciklodextrinek a gyógyításban.
Az ábrán nyomom követhető, ahogy a hatóanyaggal „töltött” üregeket felváltották az üres nanoüregek (Cyclolab)

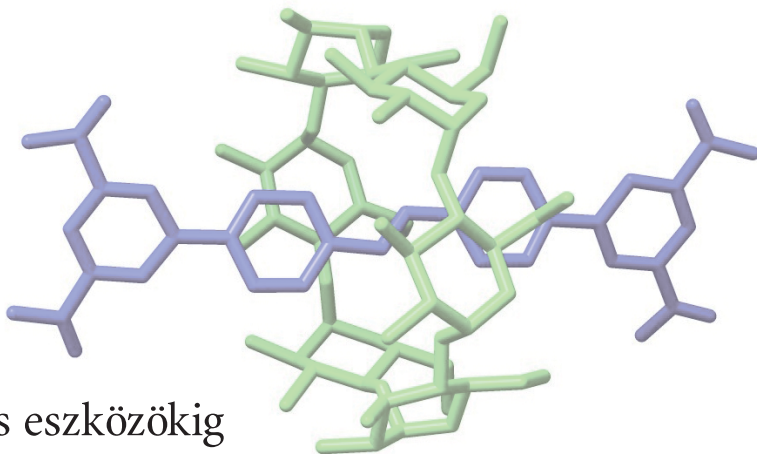


Szente Lajos

CycloLab Kft.

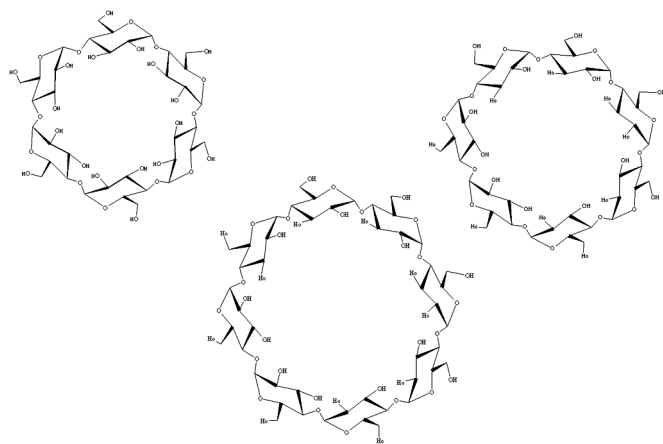
Ciklodextrinek

Nanoméretű konténerektől a terápiás eszközökig



A ciklodextrinek szerkezete és funkcionális sajátosságai

A ciklodextrinek (CDk) azon ritka ipari nyersanyagok közé tartoznak, melyek a pertolkémiától függetlenül: forrásuk a növényi fotoszintézis következtében folyamatosan újratermelődő poliszacharid, a keményítő. A keményítőtől enzimikus átalakítással ma már jó hozammal, nagy tisztaságban és gazdaságosan állíthatók elő. Az iparilag gyártott alap ciklodextrinek hat (alfa-CD), hét (béta-CD) vagy nyolc (gamma-CD) glükopiranoz-egységből álló, kónikus henger alakú tartálmolekulák, egyszerűsített szerkezetüket az **1. ábra** mutatja.



1. ábra. Az alfa-, a béta- és a gamma-ciklodextrin szerkezete

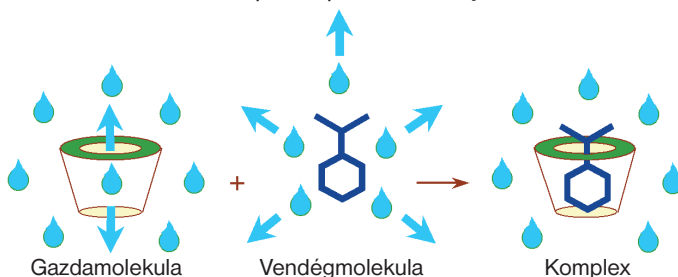
A ciklodextrin cilindermolekulák ürege a glükózegységek számától függően 0,5–1,0 nanométer között változik. Ezekbe a kis nanotartályocskába alifás molekulák, egy-három aromás gyűrűből álló szerkezetek is részben vagy egészben beleférnek. A ciklodextrinek üregét bélelő glikozidos oxigén-hídatomok és hidrogének miatt a gyűrű belső felszíne apoláris sajátosságú. A külső felszínen elhelyezkedő hidroxilcsoportok a molekulát kívülről polárisá, vízben oldódóvá teszik. [1]

A ciklodextrinek funkcionális sajátossága: a zárványkomplex-képzés

A ciklodextrinek, mint gazdamolekulák, képesek magukba zárni a víznél kevésbé poláris, geometriailag az adott üregnek megfelelő méretű „vendég”-molekulákat. E molekuláris „vendégszeretet” eredménye a reverzibilis, nem-kovalens zárványkomplexek képződése (**2. ábra**).

A zárványkomplexben épült vendégmolekula a körülményektől

A komplexképződés sémája



2. ábra. A ciklodextrin zárványkomplex-képződés egyszerűsített folyamata (az ábrán lévő cseppek vízmolekulákat reprezentálnak)

függő mértékben és ideig tartózkodik a ciklodextrinben, abból disszociációval szabadabbá válhat. A ciklodextrinek zárványkomplex-képző tulajdonsága többféle gyakorlati hasznosítási lehetőséget kínál. A komplexképződés lényegében molekuláris szintre kicsinyített csomagolási-kapszulázási folyamat. A ciklodextrintechnológia első, kb. 25 évig tartó korszakát a zárványkomplex-képződésen alapuló alkalmazások jellemezték, a gyógyszer- és élelmiszeriparban, ezt követően a kozmetikában is. [2, 3, 4]

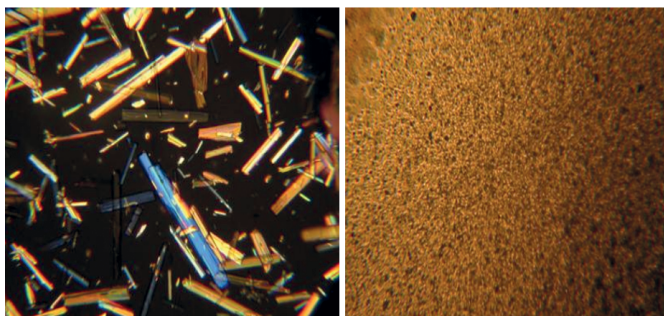
A zárványkomplex-képződés gyakorlatban hasznosítható primer következményei:

- **új szilárd fázisok létrejötte:** folyékony vagy gáz halmazállapotú anyagok ciklodextrin-komplexei szilárd kristályos vagy amorf megjelenésűek, illetve a kristályos vegyületek molekuláris diszperz komplexei rendszerint új kristályformák is;
- **molekuláris kapszulázás:** a ciklodextrin-nanöuregekbe zárt hatóanyagok molekulárisan diszperz állapotba kerülnek, „becsomagolt” állapotuk miatt stabilitásuk mind fizikai (pl. illékonyság), mind kémiai (pl. oxidáció, fotokémiai bomlás stb.) értelemben fokozódik.

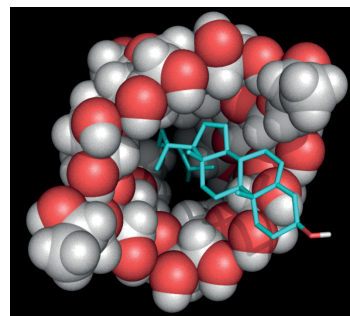
Új típusú szilárd fázisok létrejötte: A zárványkomplex-képződés során folyékony és gáz halmazállapotú anyagok is szilárd állapotba kerülnek. [5] A kristályos vegyületek ciklodextrin-komplexei pedig többnyire új típusú kristályos megjelenést mutatnak, vagy amorf szilárd fázisokká alakulnak (**3. ábra**).

A ciklodextrinalapú molekuláris „gondoskodás” stabilitásfokozó hatása

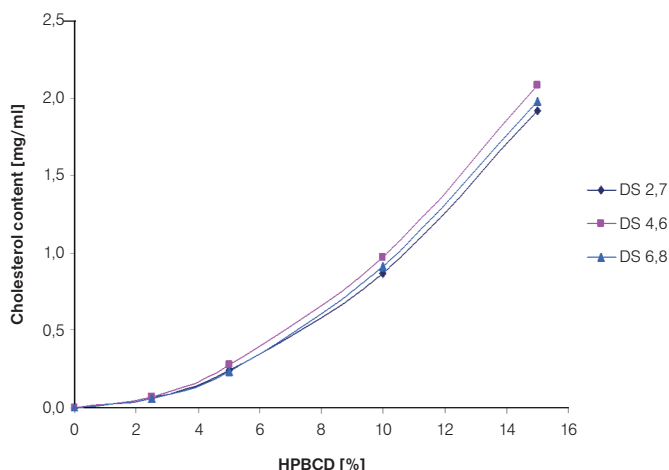
A ciklodextrin üregében „megbúvó” vendégmolekulák a környezet hatásaival szemben védett állapotban tartózkodnak mindad-



3. ábra. A piroxikám (fent, bal oldali fotó) és a piroxikám-beta-ciklodextrin zárványkomplex (fent, jobb oldali fotó) azonos nagyságú mikroszkópos képe polarizált fényben, és ezt a komplexet tartalmazó, piacon levő gyógyszerek



5/a ábra. A koleszterin hidofil „burkolása” hidroxipropil-beta-ciklodextrinnel: a képződött zárványkomplex számítógépes modellje [7]



5/b ábra. A koleszterin vízdékonysága hidroxipropil-beta-ciklodextrin jelenlétében szobahőmérsékleten

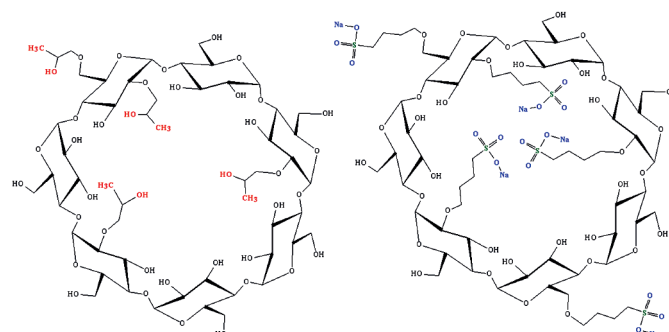


6. ábra. Néhány, ciklodextrinnel szolubilizált (diklofenak, indometacin, alfaxalon és ziprasidon hatóanyagú), forgalomban levő gyógyszerkészítmény

- a 2-hidroxipropil-beta-ciklodextrint (HPBCD);
- a 2-hidroxipropil-gamma-ciklodextrint (HPGCD);
- a szulfobutiléter-beta-ciklodextrint (SBECD) (7. ábra).

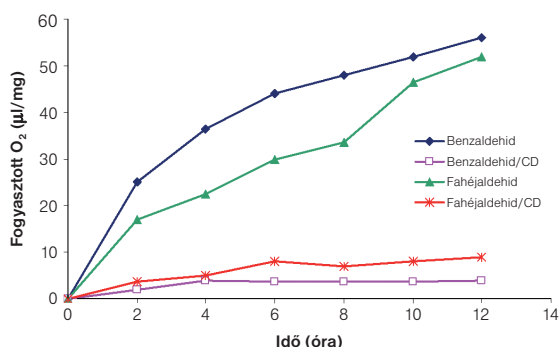
Mindhárom szolubilizáló ciklodextrinre igaz, hogy sok komponensből álló kompozit izomerelegy, amely szilárd állapotban amorf, higroszkópos por, vízben, kitűnően oldódik. Mindhárom

7. ábra. A két leggyakrabban használt szolubilizáló segédanyag, a 2-hidroxipropil-beta-ciklodextrin (bal oldali rajz) és a szulfobutiléter-beta-ciklodextrin (jobb oldali rajz) egyszerűsített szerkezete



dig, míg e komplexek nem disszociálnak. A molekuláris kapszulázottság következtében az illékony vegyületek mozgékonyasága, egyensúlyi gőznyomása csökken, fizikai értelemben stabilak maradnak. A kémiai értelemben érzékeny molekulák komplexált állapotban védettek maradnak, stabilitásuk megnő.

A ciklodextrinek stabilizáló hatását a 4. ábra illusztrálja. A szabad állapotban gyorsan oxidálódó aldehidek ciklodextrin-



4. ábra. A szabad és a komplexbe zárt benzaldehid és a fahéjaldehid oxigénfogyasztása Warburg-készüléken meghatározva

komplexbe zárt formában még tiszta oxigénatmoszférában is alig fogyasztanak oxigént és alakulnak a megfelelő savvá. [6]

A ciklodextrinek mint oldékonyságfokozó segédanyagok

A lipofil hatóanyagok ciklodextrin-komplexeinél a ciklodextrin hidofil külsejű burokként öleli körül a vendégmolekulát, „elfedi” annak hidrofób jellegét. Ez a hidofil csomagolás fokozott vízdékonyságot biztosít a lipofil vendégmolekula számára (5/a és 5/b ábra).

Az oldékonyság fokozására csak olyan ciklodextrinek alkalmasak, melyek vízben szinte korlátlanul oldódnak és oldott molekuláik nem mutatnak számottevő önszerveződést, aggregációt. [7] Napjainkban több engedélyezett oldatos gyógyszerformában három ciklodextrin-származékot alkalmaznak szolubilizálószerként (6. ábra):



ciklodextrin-származék hatékonyan fokozza lipofil vegyületek víz-oldékonyságát, és toxicitást még nagy koncentrációban sem okoz az élő szervezetben. [8]

Az üres ciklodextrin-nanoüregek terápiás alkalmazása

A ciklodextrin kutatás-fejlesztés 2000 körül váratlan, új irányt vett: ekkor kezdtek el olyan biológiai jellegű eredményeket publikálni, melyek szerint egyes ciklodextrinek, bizonyos koncentrációban és körülmények között, önmaguk is mutatnak terápiás hatásokat.

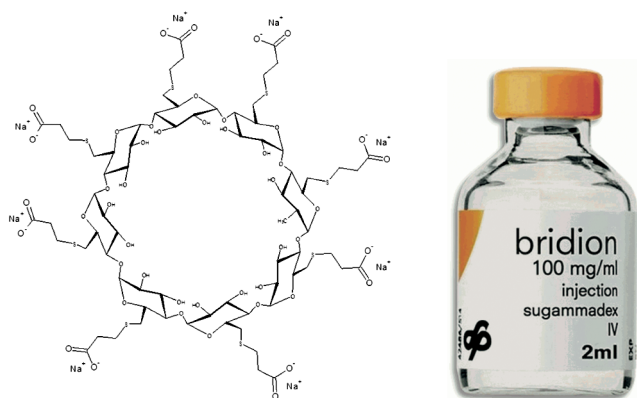
Egy ciklodextrinből gyógyszer lesz: Sugammadex® az aneszteziológiában

A szelektív komplexképzésen alapuló eljárás, melynek során egy „üres” ciklodextrint alkalmaztak sikerrel klinikai detoxikálásra, 1983 óta ismert. [9, 10] Hasonló elvet követ egy, már gyakorlatban megvalósult módszer, ahol célzottan egy adott farmakon csapdába ejtése és a szervezetből történő eltávolítása valósul meg egy ciklodextrin-származék segítségével. Az eljárás során a gyógyszer-hatóanyag igen nagy stabilitási állandójú zárványkomplexet képez a ciklodextrin antidótummal. Az AKZO-Organon kutatói a műtét altatásánál használt izomrelaxánsok (az aminoszteroid szerkezetű rokurónium) eltávolítására tervezték meg és szintetizálták, majd engedélyeztették a fenti hatóanyagot szelektíven és rendkívül erősen komplexáló ciklodextrint. [11] A fejlesztés célja a műtét altatás kockázatának és a posztoperatív ápolás költségeinek csökkentése volt olyan módon, hogy az eljárás ne járjon számottevő mellékhatással. Az izomrelaxánsra hangolt „kémiai csapda” az optimalizált gazdamolekula, egy gamma-ciklodextrin, melynek az összes nyolc primer hidroxilcsoportját tiopropánsavval helyettesítették, míg a 16 szekunder hidroxilcsoport érintetlen maradt (8. ábra).

A Sugammadex-rokurónium zárványkomplex stabilitási állandója 10^7 1/M nagyságrendű, azaz a fiziológiás körülmények között a komplex disszociációja nem történik meg. Ily módon az izomlazító a beteg szervezetéből egy újabb antidótum hatóanyag alkalmazása nélkül távozik. [12]

A Sugammadex/Bridion® termék fejlesztése – amely a nem-kovalens komplexképződés gyakorlati alkalmazhatóságának eleghány példája – a modern ciklodextrinkémia talán legjelentősebb felfedezése.

8. ábra. A Sugammadex, a rocuróniumra hangolt gamma-ciklodextrin kémiai csapda szerkezete (bal oldalon) és azt tartalmazó injekciós készítmény



Ezzel az újszerű terápiás eljárással további lehetőségek nyíltak a ciklodextrinrel segített szelektív hatóanyag-mobilizálás, vagy éppen -immobilizálás elvén működő terápiák kidolgozására. Jelenleg több biztató klinikai vizsgálat folyik súlyos mérgezést okozó toxinok ciklodextrin-komplexálással történő eltávolítására, a toxin célmolekulák szerkezetére hangolt kémiai csapdák alkalmazásával. [13]

Ciklodextrin a ritka, gyógyíthatatlan betegség kezelésében

A Sugammadexhez hasonló működési elvet követve kapott „Orphan Drug” („árva gyógyszer”: ritka betegségek gyógyítására szolgáló orvosság) státuszt az injekciós adalékanyagként régóta használt hidroxipropil-béta-ciklodextrin egy ritka, gyógyíthatatlan lipiddárolási betegség terápiájában. Az FDA ezt a ciklodextrint önmagában, a gyermeki Alzheimernek is nevezett (Nieman-Pick C) betegség kezelésére engedélyezte 2010-ben.

Aktív részben igazolt – lényege, hogy a lipiddárolási és -mobilizáló ciklodextrin a sejtekbe jutva „átvállalja” a genetikai hiba miatt hiányzó koleszterin- és gangliozid-szállító fehérjék működését. [14, 15] A hidroxipropil-béta-ciklodextrin az Egyesült Államokban, Japánban és az EU-ban Orphan Drug státuszt kapott a gyógyíthatatlan lipiddárolási betegség kezelésére. [16] Jelenleg a világon 14 páciens kezelése folyik, néhányukat már több mint 5 éve tartják életben ezzel a lipiddárolási komplexképzésen alapuló módszerrel.

Összefoglalás

Az elmúlt csaknem 40 év alatt a ciklodextrin-technológia a modern ipar szinte minden területén talált gyakorlati alkalmazást. A ciklodextrin-tartalmú termékekből jelenleg több mint 50 humán gyógyszer, kb. ezer élelmiszer-ipari-, kozmetikai és háztartásvagyipari termék szolgálja az emberiség egészségét kényelmét.

Az 1975-ben, Szejtli József által kezdeményezett és évtizedekig „vezényelt” szisztematikus ciklodextrin kutatás-fejlesztés és ipari termelés következményeként a ciklodextrinek tankönyvi tétellé és ipari komoditássá váltak. A munkásságunk kezdetekor néhány gramm szinten elérhető, igen drága és kétes jövőjű szénhidrát segédanyagokból ma évente 14–15 ezer tonnát használnak fel. A ciklodextrinrel kapcsolatos tudományos publikációk és szabadalmak megjelenésének dinamikája – még 40 év után is – töretlen, jelenleg 62 000 közleményt tartunk nyilván, melyhez a magyar ciklodextrin-kutatás hozzájárulása igen jelentős. Tán emiatt is sorolja a szűkebb szakma a hazai ciklodextrin kutatás-fejlesztést a világ élvonalába.

IRODALOM

- [1] Szejtli, J., Chem. Rev. (1998) 30, 98, 5, 1743.
- [2] Szejtli, J., et al., Acta Chim. Acad. Sci. Hung. (1979) 101, 1–2, 27.
- [3] Buschmann, H. J., Schollmeyer, E., J. Cosmet. Sci. (2002) 53, 3, 185.
- [4] Citeresi, U., Sciacchitano, M., Cosmetics and Toiletries (1995) 110, 53.
- [5] Szejtli, J., Cyclodextrin Technology, Kluwer Acad. Publ. Dordrecht, Netherlands, 1988.
- [6] Sente, L., Szejtli, J., Trends in Food Science & Technology (2004) 15, 3–4, 137.
- [7] Sente, L., Szejtli, J., Adv. Drug Del. Rev. (1999) 36, 1, 17.
- [8] Stella, V. J., He, Q., Toxicol. Pathol. (2008) 36, 1, 30.
- [9] Pitha, J., Sente, L., Life Sci. (1983) 32, 7, 719.
- [10] Carpenter, T. O. et al., J. Pediatr. (1987) 111, 4, 507.
- [11] Bom, A. et al., Angew. Chem. Intl. Ed. (2002) 41, 2, 265.
- [12] Naguib, M., Anesth. Analg. (2007) 104 3 : 575.
- [13] Cai, Kai-Yong; et al., Chemical Communications (2011), 47 27, 7719.
- [14] Matsuo, M., et al., Mol. Genet. Metab. (2013) 108 76.
- [15] Ramirez, C. et al., Pediatric Research (2010) 68, 309.
- [16] Liu, B. et al., J. Lipid Res (2010) 51, 933.



Szóri Milán–Jóárt Balázs–Viskolcz Béla

■ SZTE Kémiai Informatikai Tanszék

milan@jgypk.u-szeged.hu | joartb@jgypk.u-szeged.hu | viskolcz@jgypk.u-szeged.hu

Szerveződő kémiai rendszerek számítása

A kémiai rendszerek szerveződését különböző szinteken figyelhetjük meg, a szerveződés minden szintjén új fizikai, kémiai (és biológiai) tulajdonságok jelennek meg. Két alapvető szemlélet alakult ki az összetett rendszerek megismerésére. A redukcionista elmélet a rendszerek egy jellemző vagy különleges részének vizsgálatára törekszik, míg a holisztikus szemlélet a teljes rendszer egységes kezelését tűzi ki célul. A mérési módszerek elérhető és szükséges pontossága befolyásolja a megközelítési mód kiválasztását. A számítógépes kémiai vizsgálatok esetén, a véges számítási kapacitások miatt, a rendszer mérete szabja meg a rendszerről szerezhető információk körét, a számítások pontosságát és az adott rendszer vizsgálatához rendelkezésre álló eljárásokat is.

A legkisebb önálló szerveződésen alapuló kémiai rendszernek tekinthetjük az egyedi molekulákat, amelyek az atomok megfelelő kombinációjából alakulnak ki. Ezen kis rendszerek tulajdonságait nagymértékben befolyásolhatja a környezet hatása, ennek figyelembevételével a kísérleti tapasztalatokat jobban megérthetjük és jobb előrejelzéseket tehetünk. A molekulák egyedi tulajdonságait az atommagok körüli elektroneloszlás határozza meg, ennek megismerésére az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet közelítő megoldásával nyílik lehetőség (kvantumkémiai számítások). Az egyes molekulák kémiai környezetének leírása jelenti a következő lehetséges szerveződési szintet, ahol a molekulák kölcsönhatása (asszociációja) új tulajdonságok megjelenésével jár. A vizsgált rendszer méretének növekedése és az ezzel együtt járó új tulajdonságok megjelenése miatt a megfigyelőknek is más (elméleti) nézőpontot célszerű választani. A nézőpontváltás fő oka technikai: a számolások időigénye módszertől függően a rendszer méretével növekszik, sok esetben a részecskeszám va-

lamelyik magasabb hatványa szerint, így a lehetséges vizsgálatoknak gátat szab a rendelkezésünkre álló számítógépes kapacitás. Hogy nagyobb rendszerek esetén is célt érhessünk, a kémiai rendszer elektroneloszlással történő leírását feladva, a molekulák térbeli tömegpontok különböző erősségű rugókkal összekötött hálózatával írjuk le. A tömegpontok töltéssel rendelkező részecskék, távolságukat és térbeli kiterjedésüket korábbi tapasztalatok (pl. kvantumkémiai számítások) szerint írjuk le (erőtér).

A kémiai kutatások egyik alapvető kérdése, hogyan alakulnak ki ezek a szervezett rendszerek. A kialakuló új tulajdonságok leírását, sok esetben előrejelzését megadhatjuk-e napjaink egyik legdinamikusabban fejlődő kutatási területének, a számítógépes kémiának az eszközeivel? Manapság közhelynek számít, de a proceszorok számítási kapacitásának évenkénti duplázódása folyamatosan újabb és újabb vizsgálati lehetőségeket nyit meg. Ezáltal a megismerés technikai korlátai egyre megszűnnek, – egy hasonlattal élve – az eddigi, kulcslyukon történő rövid leskelődés helyett hamarosan a szélesre tárt ajtón keresztül akár hosszasan is szemlélődhethetünk. Ehhez kívánunk segítséget nyújtani három különböző rendszer egy-egy vizsgálati aspektusának bemutatásával.

Az első sejtek az élet megjelenése előtt már létező (prebiotikus) molekulák ön-szerveződésével jöttek létre, melyhez az építőegységként szolgáló biomolekula-alapegységek (pl. aminosavak, cukrok, zsírsavak) képződése, illetve feldúsulása volt szükséges. Ezek az alapegységek számos szerkezeti izomerrel (a molekulák összetétele azonos, ám az atomok kapcsolódási sorrendje már nem az) rendelkeznek, viszont közülük csak néhány vált a biomolekulák építőelmévé. A molekuláris szintű evolúciós „kiválasztási szabályok” alig-alig

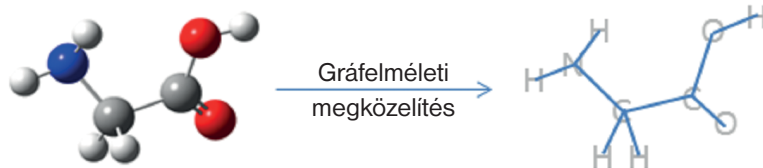
ismertek, feltételezésünk az, hogy a termodinamikai tényezők főszerepet játszanak a molekuláris evolúcióban. Egy adott biomolekula alapegységének összes szerkezeti izomerének meghatározásával, illetve ezen szerkezetek energetikai jellemzőinek ismeretében ezt mutatjuk meg.

A kémiai evolúcióban is alapvető szerepet játszanak a két fázis határán (pl. víz-levegő, levegő-szerves anyag, víz-szerves anyag) kialakuló, különleges tulajdonságokkal rendelkező határrétegek. Ezen határrétegekben megjelenő új tulajdonságok és lejátszódó reakciók leírása csak megfelelő számú felületalkotó molekula együttes vizsgálatával végezhető el.

A biológiai környezetben előforduló legfontosabb határrétegeknek, a kettős lipidrétegeknek alapvető szerepe, hogy elhatárolják egymástól a különböző minőségű közegeket, és a két közeg közti anyagáramlásokat szabályozzák (pl. folyadékokat, különböző koncentrációjú oldatokat, sejtek belső tereit stb.). Ezen funkciójuk mellett, szelektivitásuk következtében a hidrofób karakterrel rendelkező molekulák számára átjárhatóak (permeábilisak), míg a töltéssel rendelkező részecskék (ionok) áthaladását gátolják. Érdemes azt is megjegyezni, hogy az ilyen lipidrétegek kialakulása nemcsak sejtek belső folyamatai által, hanem önszerveződéssel is képes lejátszódni.

Biomolekulák építőköveinek kialakulása

A szisztematikusan végzett kvantumkémiai számításokkal egy adott biomolekula-építőegység összes izomerének energiáját, illetve kémiai potenciálját meghatározhatjuk, és ennek alapján sorba rendezhetjük őket. Az egyensúlyi termodinamika szerint a kisebb kémiai potenciálú izo-



1. ábra. A molekulák felfoghatóak csúcsokból és élekből álló „hálózatként”

mer a rendszer legvalószínűbb állapota. Minél nagyobb a kémiai potenciál, annál kisebb az adott izomer mennyisége (populációja) az azonos szerkezetek közül. A sorrend kialakításának feltétele az összes lehetséges szerkezeti izomer előállítása. Ehhez a legegyszerűbb a molekulákat olyan egybefüggő „hálózatnak” (gráfnak) elképzelni, amelyben a többszörös összekötések és esetleg hurkok megengedettek (zárt multigráf), és melynek csúcsai az atomok, és az élek a kötések (1. ábra).

Ismert kémiai összegképlet esetén (pl. $C_2H_5NO_2$) az atomokhoz tartozó lehetséges kovalens kötések számával (kovalencia) megadható a gráfelméletileg lehetséges összes hálózati összekötés, azaz szerkezeti izomer. Az így előkészített háromdimenziós szerkezetek csak közelítőleg felelnek meg a valódi szerkezeteknek. Az energiaminimum elve szerint az a szerkezet létezik, amelynek energiája minimális (legalábbis lokálisan). Ehhez az atomok egymáshoz képesti távolságait változtató kvantumkémiai számításokra (geometriai optimalítás) van szükség, melynek során számos korábban szerkezeti izomernek gondolt szerkezetről kiderül, hogy nem létezik. A létező izomerek száma kevesebb, mint a gráfelméleti megfontolások alapján

várható lenne. A geometriai optimalításokkal kapott izomerek legfőbb molekuláris és termodinamikai tulajdonságai megadhatók (pl. képződéshő, relatív stabilitás, kémiai potenciál, hőtartalom, fajhő).

A legegyszerűbb fehérjealkotó építőkö, a glicin kialakulásának termodinamikai feltételeit vizsgáltuk meg úgy, hogy a $C_2H_5NO_2$ összegképlethez tartozó lehetséges izomereket vizsgáltuk, gráfelméleti alapon. A lehetséges 404 szerkezeti izomer közül a glicin különböző protonáltsági állapotai (N5 és N6) „csak” a rangsor 5. és 6. pozícióját foglalják el (2. ábra). A számítások egy olyan izomer létezését is megjósolták, amely – a legjobb tudomásunk szerint – ez idáig nem volt ismert (a 2-aminometil formát, mely a rangsor 9. eleme, N9). Az alacsonyabb kémiai potenciálú molekulák (N1–N3 molekulák a 2. ábrán) reaktivitását megvizsgálva megmutatható, hogy ezek a vízzel reagálva gyorsan átalakulnak vagy elbomlanak. Ily módon a biomolekula-egységek (kémiai szintű) evolúciójában nemcsak a termodinamikai stabilitás, hanem a reaktivitás is fontos szerepet játszik. Ezzel a víz egy további lehetséges szerepét sikerült feltárni a molekuláris evolúcióban [1].

A glicinnél stabilabb 2-hidroxi-acetamid-

ból (N4) a peptidkötés kialakulása termodinamikailag kedvezőbb folyamat ($\Delta G = -28,0$ kJ/mol), mintha a glicin lenne a monomer ($\Delta G = -16,4$ kJ/mol). A kialakuló polipeptidben a különbség a C- és N-terminális végeken jelentkezik, de ez a különbség a polimerizációfok növekedésével egyre kisebbé válik. Így egy termodinamikailag kedvezőbb reakcióutat mutatunk meg a poliglicin kialakulására (3. ábra) [1].

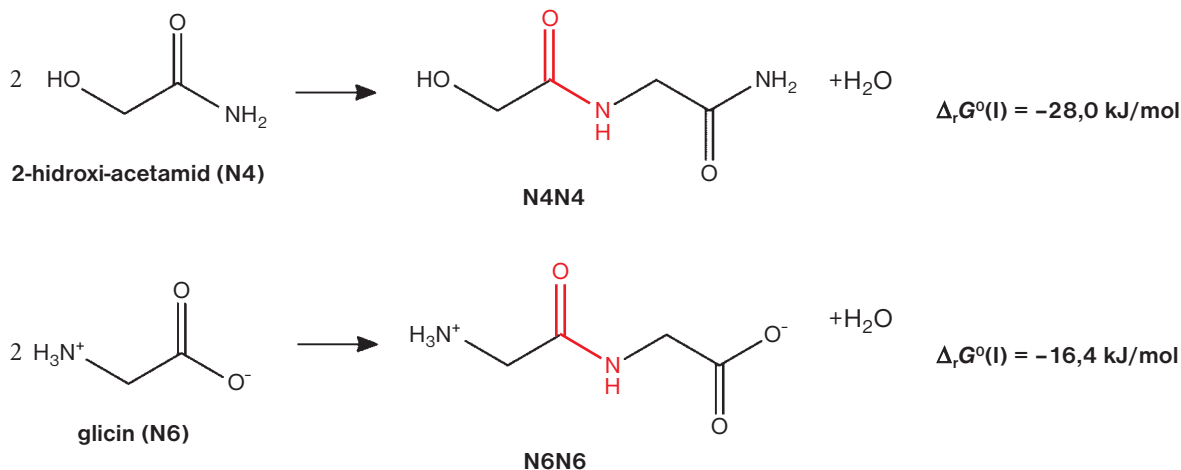
Kémia a „határon”?

A határfelületi jelenségek számos esetben segítik az egymással egyébként nem, vagy csak nagyon lassan reagáló anyagok reakcióját. Ez szolgál az élő szervezetek enzimikus reakciói mellett több vegyipari eljárás alapjául. Hasonlóképpen, az atmoszféra parányi szálló részecskéinek (az aeroszoloknak) felületén zajlik le a légköri folyamatok egy jelentős része. Többek között e részecskék segítik elő a csapadékképződést, így jelentősen befolyásolják a klímát. Az aeroszolat elsősorban szerves vegyületek borítják, és a határfelületeken lejátszódó fizikai folyamatok megértéséhez elengedhetetlen a felületi határréteget alkotó komponensek minőségének és mennyiségének ismerete (pl. a különböző komponensek egymáshoz viszonyított aránya és a komponensek eloszlása). Az oxidatív atmoszférának kitett aeroszol felület összetétele, különösen a gyors, gyakran párosítatlan elektront is tartalmazó részecskék (szabad gyökök) hatására nagymértékben átalakul. Ennek következtében jelentősen változik a felületet alkotó komponensek vízzel szembeni affinitása (hidrofilitása) és ezzel együtt a határréteg víztartalma és annak eloszlása is.

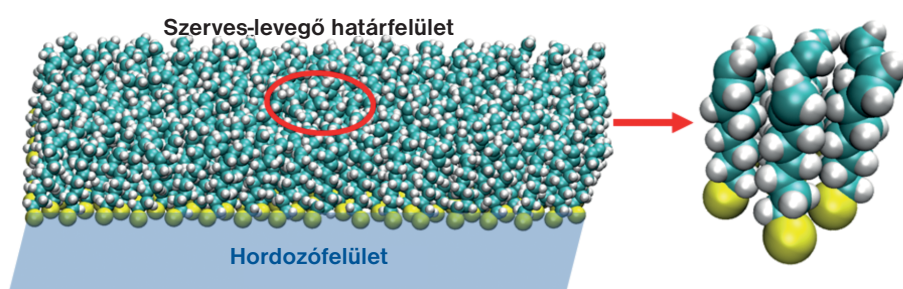
Az aeroszol felületek kísérletes vizsgálati módszereinek rohamos fejlődése ellenére, számos kérdés nyitott maradt, melyek az aeroszol felületek oxidációs mechanizmusát érintik. A körülményektől függően több mechanizmust javasolnak a képződő termékek és a kísérletileg meghatározott felület-összetételek magyarázatára [2,3], azonban ezek elméleti háttere nem igazolt. A felületi oxidációt az egymással kölcsönható szénláncok jelentősen befolyásolják, és a gázfázisú reakcióhoz képest megváltoztatják az energetikai viszonyokat és a képződő termékek arányát is. Ezeket a hatásokat kvantumkémiai számításokkal lehetséges meghatározni úgy, hogy oxidálószerként viselkedő reaktív oxigéntartalmú részecskék (pl. hidroxilgyökök (OH[•]),

2. ábra. A hat legkisebb kémiai potenciálú $C_2H_5NO_2$ izomer szerkezete. A kémiai potenciál számításánál a vizes közeget egyszerű oldószer modellel vettük figyelembe, az (I) ezt jelöli

	Szerkezet	Név	$\Delta\mu^\circ(I)$ kJ/mol
N1		metilamin-szén-dioxid komplexe	0
N2		N-metilkarbaminsav	5,2
N3		metil-karbamát	22,7
N4		2-hidroxi-acetamid	34,5
N5		glicin	40,2
N6		glicin (ikerionos forma)	44,3



3. ábra. A polikondenzációs reakciók első lépései és a hozzájuk tartozó reakció-szabadentalpiák ($\Delta_r G^\circ(I)$). Pirossal jelöltük a molekulák peptidkötését



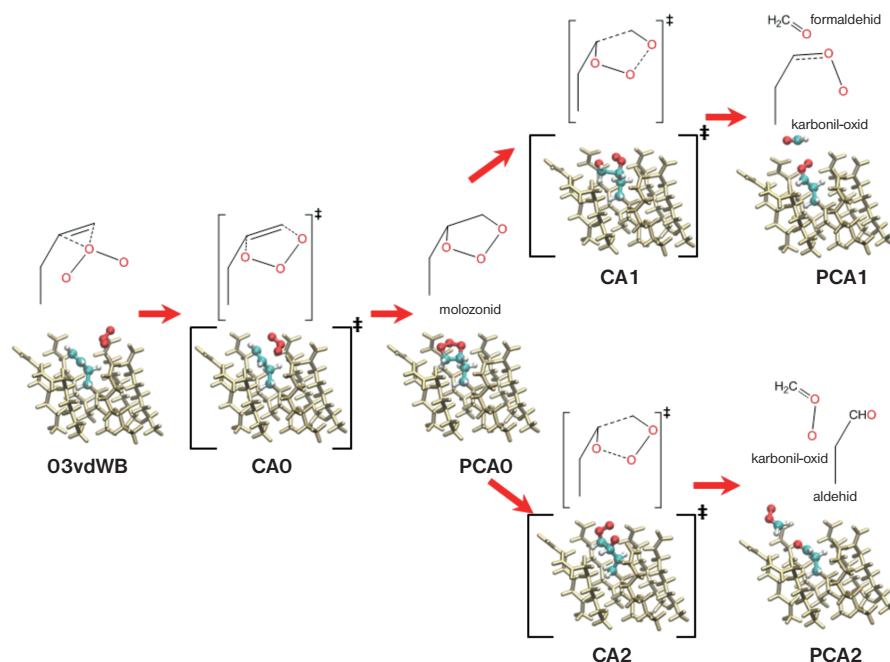
4. ábra. Az önszerveződő szerves felület

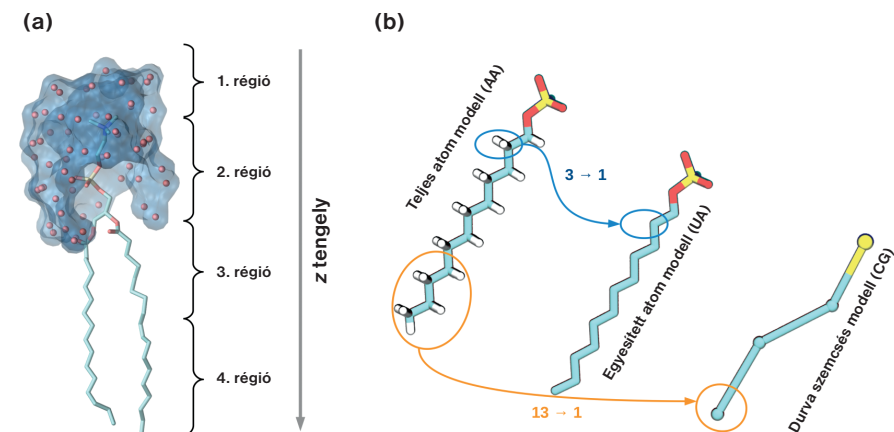
hidroperoxil-gyök (OOH^\bullet), ózon (O_3)) felületen végbemenő molekuláris folyamatait és az elemi kémiai reakciók lépéseit derítjük fel. Ehhez az aeroszolatokat borító szerves molekulák sokaságát modellezendően 1-oktén-tiolátokból ($\text{S}-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}=\text{CH}_2$) képzett önszerveződő monomolekulás réteg használható. A tiolcsoport egy úgynevezett hordozó felülethez elsőrendű kémiai kötással kapcsolódik, rögzítve ezzel a molekula egyik végét. Az ilyen módon rögzített végpontok egymáshoz közeli elhelyezkedése végzi el a molekulák nagyfokú rendezettségét (önszerveződését) és ezzel a szerves-levegő határfelület kialakítását (4. ábra). A modellalkotás során az így kiválasztott szerves határfelület a valóságban kísérletileg is előállítható, ezáltal lehetséges a számítási eredmények közvetlen ellenőrzése. Nagy előnye e duális technikának, hogy a kísérletek és a számítások idealizált felületen történnek, és a feltételek, valamint a körülmények szisztematikus változtatásával kapjuk a kívánt információkat. A felületen végbemenő folyamatokat befolyásoló tényezőket pontosan azonosíthatjuk, és a reális komplex rendszerek pontos leírására is tudjuk alkalmazni.

A szerves felületek oxidációs folyamatai közül a szerves felület ózonnal (O_3) törté-

nő reakcióját, az ózonolízist mutatjuk be részletesebben. A mechanizmus egyes lépéseire tartozó számított háromdimenziós szerkezeteket az 5. ábra mutatja.

5. ábra. A szerves felület ózonos oxidációjának (ózonolízis) mechanizmusa és az elemi lépésekhez tartozó számított térszerkezetek. Az átmeneti állapotokhoz tartozó szerkezeteket zárójellel és \ddagger szimbóllummal jelöltük





6. ábra. A membránok 4 régiós modellje az 5,5 Å távolságon belül lévő vízmolekulákkal (a) és a számítási modellek egyszerűsítési lépései (b)

stabil terméké. Az egyik csatornán a formaldehid mellett kialakult termék a karbonil-oxid (PCA1), könnyen karboxil-csoporttá képes átrendeződni, hasonlóan a másik csatornán hangyasav és aldehid zárja a reakciót. Így az ózonolízis során mindkét úton rövidült a szénlánc, és a felületen megjelenő karbonil- és karboxil-csoportok jelentősen megváltoztatják az addig hidrofób felületet, és ezzel együtt a vízfelületi megkötődését, adszorpcióját is.

A felületi szorpciós jelenségek modellezéséhez sokatomos rendszer összeállítása szükséges (nagyságrendileg 10 000 atom, kb. 70 000 elektron). A rendszer mérete miatt – ahogy azt a bevezetésben is említettük – szükségszerű a molekulákat alkotó atomok különböző erősségű rugókkal összekötött, tömeg- és töltésközpontokkal ellátott hálózatának egyszerűsített leírása. Ezen molekulák preferált orientációit és pozícióit vizsgáljuk oly módon, hogy a rendszerünkben az atomokat a vizsgált hőmérsékletnek megfelelő mozgási energiával látjuk el, és bizonyos időközökkel megoldjuk rá a newtoni egyenleteket (molekuladinamika (MD)). A rendszerek heterogenitása miatt az egyensúly kialakulásáig nagyon sok lépést kell számítani, ami sok esetben korlátokba ütközik. Ez esetben az atomi szintű modell helyett, a kevesebb paramétert tartalmazó molekulacsoport-szintű ún. durva szemcsés modell alkalmazása lehet egy célszerű alternatíva (ahogy azt majd a membránszimulációknál látni fogjuk). Ez a formalizmus a számítás időigényét csökkenti nagymértékben. A másik megoldás, amit a vízadszorpciós számításoknál is alkalmaztunk, hogy a mintavételezést Monte-Carlo-technikával végezzük el, így lemondunk az MD során szerezhető dinamikai információkról. Ez

utóbbi esetben a cél a „véletlenszerű” molekulakonfigurációk Boltzmann-eloszlás szerinti súlyozott mintavételezése, összegyűjtése. Így egyedül az egyensúlyi állapotról szerzünk fontos információkat: atomi szinten a kötési energiák eloszlásáról, a vízmolekulák felszín közeli orientációjáról vagy az adszorpciós izotermákról, mint makroszkopikus paraméterről.

Membránok – felület és fázis önszerveződése

A sejtmembránok kettősrétegeit elsősorban foszfolipid molekulák építik fel, melyek fejcsoportjukat („foszfo”-csoport) tekintve hidrofílek, míg a további zsírsavréz (lipid) hidrofób karakterű. A kialakuló kettősrétegben a fejcsoport a vizes fázis felé orientálódik, és erősen hidratált. A hidrofób szénlánc a kettősrétegben a fejcsoportok segítségével elzártan helyezkedik el a vizes fázistól úgy, hogy az 1–1 rétegben lévő szénláncok egymás felé orientálódnak. Marrink és Berendsen elméleti munkája alapján alakult ki a membránok 4 rétegű modellje (6. ábra).

Ha a membránt úgy képzeljük el, hogy a z tengely mentén haladva tartunk a vizes fázistól a membrán belseje felé, akkor a tengely mentén bekövetkező hidratáció és sűrűségváltozás adja meg a membránok 4 rétegét [4]. A modell szerint az első régióban már kialakul a kölcsönhatás a lipidek fejcsoportja és a vízmolekulák között, valamint itt történik/történhet meg egyéb sejtalkotókkal további kölcsönhatás is. A második régióban a legnagyobb a membrán sűrűsége és a hidratációja. A következő régió a szénláncokból álló rész, és a hidrofób rész sűrűsége is itt a legnagyobb. A 4. régióra a nagyon kicsi hidratáció, ala-

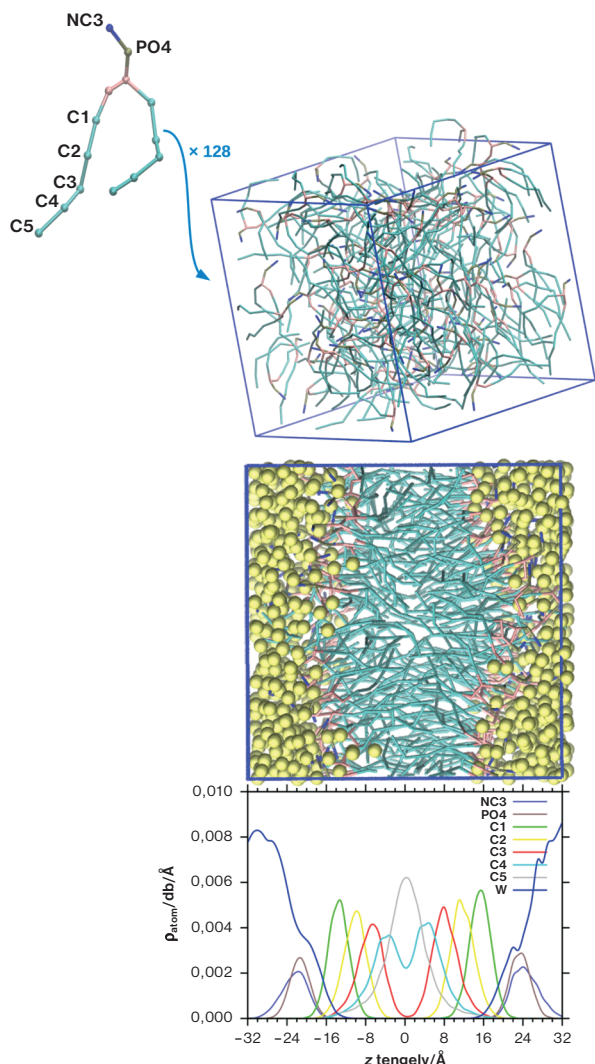
csony sűrűség jellemző, a határfelület hatása itt már teljesen elhanyagolható.

A membránok szerkezete nem állandó, alkotói egymáshoz képesti helyzetüket állandóan változtatják, ezért könnyen belátható, hogy olyan elméleti kémiai módszerekkel tudjuk őket jellemezni, amelyek dinamikus mozgásukat képesek leírni, illetve kellően gyorsak. Erre a molekuláris rendszer erőtszintű leírásának alkalmazása mellett, a molekuláris dinamikai szimulációk adnak lehetőséget.

Az erők több típusát is megkülönböztetjük attól függően, hogy a szimuláció során használt tömegpontok (kölsönhatási pontok) hány atomnak felelnek meg. Ha egy kölsönhatási pont egy atomot reprezentál, akkor „teljes atom” modellekről beszélünk („all-atom models”, AA). Ha kisebb atomcsoportokhoz rendeljük ezeket a kölsönhatási pontokat, akkor kapjuk az „egysített atom” modelleket („united atom”, UA [5,6,7]). Ha ettől még több atomot vagy molekulákat is egy kölsönhatási ponttal helyettesítünk, „durva szemcsés” („coarse-grained”, CG [8,9,10,11,12]) modellekről beszélünk. Az egyszerűsítések következtében csökken az egy adott atomi elrendeződéshez szükséges számolási idő. Az egyszerűsítések lépcsőfokait a dodecilszulfát-molekula példáján a 6. ábra mutatja be: a kialakított modellben a kölsönhatási pontok száma gyakorlatilag egy nagyságrenddel csökken az AA, UA és CG sorrendben: 43, 17 és 4. Ennek megfelelően a számítási igény is jelentősen csökken.

Az egyszerűsítési lépésekkel az adott rendszer vizsgálatához szükséges számítási időt jelentősen le tudjuk csökkenteni, ám természetesen ez mit sem érne, ha az így kapott modellre az eredmények nem tükröznék a valóságot, vagy nem tudnák megadni a valóság minőségi leírását. A szakirodalomban rengeteg olyan munkát találunk, melyek a CG modellek segítségével fényt derítettek micellák képződésére [13, 14, 15, 16], összetett membránrendszerek tulajdonságaira [17, 18, 19], illetve membránproteinek asszociációjára [20]. Ezen jelenségeket a mai számítási kapacitások mellett teljes atom modellek segítségével esetleg csak nagyon kivételes esetekben lehetne vizsgálni.

A továbbiakban szolvatált, 128 darab disztearát-foszfátidil-kolin (DSPC) (7. ábra) molekulából álló membrán önszerveződését mutatjuk be a kezdeti lépésektől a membrán kettősréteg kialakulásáig. A 128 darab DSPC molekulát véletlenszerűen rendezzük el egy $75 \times 75 \times 75 \text{ Å}^3$ térfogatú dobozban (7. ábra), majd a rendszert szol-



**7. ábra. Fentről lefelé:
a DSPC molekula durva
szemcsés (CG) reprezen-
tációja, a belőle véletlenszerű
elrendezéssel kialakított
(128 db DSPC) sokaság,
a molekuladinamikai
trajektória utolsó szerkezete
és a gyöngyök sűrűségprofilja
a z tengely mentén
(W – a víz jelölése)**

vatáljuk CG-víz molekulákkal. Az így összeállított rendszeren végezzük el a molekuladinamikai szimulációt. Így a modellrendszer 27 392 db atomnak felel meg összesen, amit 2560 db kölcsönhatási pont reprezentál.

A szimulációt a rendszer potenciális energiaváltozásával követhetjük, és megállapítható az egyensúlyi rendszer kialakulása, amikor a potenciális energia értéke állandósul. Az egyensúly kialakulása és stabilizálódása nagymértékű szerkezeti változással, önrendeződéssel jár, ami a 7. ábrán közepén jól látható. A szimuláció során szintén jól megfigyelhető, hogy a kezdeti véletlenszerű elhelyezkedés után hogyan rendeződnek a DSPC-molekulák két rétegbe. Ennek során a hidrofób karakterű kölcsönhatási pontok (C1, C2, C3, C4 és C5, lásd 7. ábra) egymással alakítanak ki kölcsönhatásokat úgy, hogy közben a víz-molekuláktól a hidrofób fejcsoportok (NC3 és PO4) elzárják a membrán kettősréteg ezen részét.

A membrán-szimulációk egyik legfontosabb eredménye a különböző membránalkotók vagy ezek különböző csoportjai

nak térbeli eloszlása, melyet az ún. sűrűségprofilal jellemezhetünk. A membránréteg felületére merőlegesen választott tengely mentén a szimulációs dobozt rétegekre osztjuk, és meghatározzuk, hogy hány darab atom, molekularészlet található az adott rétegben. Ha ezt az eljárást nemcsak egy szerkezetre, hanem a molekuladinamikai szimuláció számos lépésénél elvégezzük, majd átlagot számolunk, akkor kapjuk a 7. ábrán látható sűrűségprofil. Az ábrán jól látható, hogy a DSPC C3, C4 és C5 részei milyen kevésbé hidratáltak (a hozzájuk tartozó sűrűségcsúcsok nem fednek át a vízsűrűségprofilal), hiszen ezekben a térrészekben a víz sűrűsége gyakorlatilag nulla, hasonlóan a kísérleti tapasztalatokhoz. Ezzel szemben a fejcsoportok nagy hidratációs fokkal rendelkeznek.

Összefoglalás

Megmutattuk, hogy az összetett kémiai jelenségek az angströmöstől a több tíz nanométeres mérettartományig jól modellezhetőek elméleti kémiai módszerek se-

gítségével. A kísérleti módszerekkel csak nehezen vagy egyáltalán nem elérhető szerkezeti és energetikai információk származnak a szimulációkból. Különösen fontos ez azokban az esetekben, amikor a redukcionista közelítéssel rendszerspecifikus tulajdonságok tűnnek el az egyszerűsítéssel. Egy jól választott elméleti modell segítségével pontosan a rendszer méret növekedésével fellépő új tulajdonságok lesznek kielégítő pontossággal meghatározhatók.

KÖSZÖNETNYILVÁNTÁS.

A kutatás infrastruktúrája a „Szuperszámítógép, a nemzeti virtuális laboratórium” (TÁMOP-4.2.2/C-11/1/KONV-2012-0010) projekt által biztosított forrásból valósult meg. További forrásokat az „Új, funkcionális anyagok által kiváltott biológiai és környezeti válaszok” (TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0047) projekt biztosította. A publikáció a TÁMOP-4.2.4.A/2-11/1-2012-0001 (A2-MZPD-12-0139) azonosító számú Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergenciaprogram című kiemelt projekt által nyújtott személyi támogatással valósult meg.

IRODALOM

- [1] M. Szőri, B. Jójárt, R. Izsák, K. Szőri, I.G. Csizmadia, Béla Viskolcz, Phys. Chem. Chem. Phys. (2011) 13, 7449.
- [2] F. Karagulyan, C. W. Dilbeck, B. J. Finlayson-Pitts, J. Am. Chem. Soc. (2008) 130, 11272.
- [3] T. M. McIntire, A. S. Lea, D. J. Gaspar, N. Jaitly, Y. Dubowski, Q. Q. Li, B. J. Finlayson-Pitts, Phys. Chem. Chem. Phys. (2005) 20, 3605.
- [4] D. P. Tieleman, S. J. Marrink, H. J. Berendsen, Biochim. Biophys. Acta. (1997) 1331, 235.
- [5] L. Yang, C. H. Tan, M. J. Hsieh, J. Wang, Y. Duan, P. Cieplak, J. Caldwell, P. A. Kollman, R. Luo, J. Phys. Chem. B. (2006) 110, 13166.
- [6] J. Hénin, W. Shinoda, M. L. Klein, J. Phys. Chem. B. (2008) 112, 7008.
- [7] C. Oostenbrink, A. Villa, A. E. Mark, W. F. van Gunsteren, J. Comput. Chem. (2004) 25, 1656.
- [8] S. J. Marrink, H. J. Risselada, S. Yefimov, D. P. Tieleman, A. H. de Vries, J. Phys. Chem. B. (2007) 111, 7812.
- [9] L. Monticelli, S. K. Kandasamy, X. Periole, R. G. Larson, D. P. Tieleman, S. J. Marrink, J. Chem. Theory Comput. (2008) 4, 819.
- [10] C. A. Lopez, A. Rzepiela, A. H. de Vries, L. Dijkhuizen, P. H. Huenenberger, S. J. Marrink, J. Chem. Theory Comput. (2009) 5, 3195.
- [11] D. H. de Jong, G. Singh, W. F. D. Bennett, C. Arnarez, T. A. Wassenaar, L. V. Schäfer, X. Periole, D. P. Tieleman, S. J. Marrink, J. Chem. Theory Comput. (2013) 9, 687.
- [12] C. A. Lopez, Z. Sovova, F. J. van Eerden, A. H. de Vries, S. J. Marrink, J. Chem. Theory Comput. (2013) 9, 1694.
- [13] M. Velinova, D. Sengupta, A. Tadjer, S. J. Marrink, Langmuir (2011) 27, 14071.
- [14] H. Wang, H. Zhang, C. Liu, S. Yuan, J. Colloid. Interface Sci. (2012) 386, 205.
- [15] J. Seifollah, A. Mojdeh Colloid Surface A (2009) 352, 99.
- [16] B. Jójárt, M. Poša, B. Fiser, M. Szőri, Z. Farkaš, B. Viskolcz, PLoS ONE (2014) 9, e102114.
- [17] N. Kucerka, D. Marquardt, T. A. Harroun, M. P. Nieh, S. R. Wassall, D. H. de Jong, L. V. Schäfer, S. J. Marrink, J. Katsaras, Biochemistry (2010), 49, 7485.
- [18] T. Apajalahti, P. Niemela, P. N. Govindan, M. Miettinen, E. Salonen, S. J. Marrink, I. Vattulainen, Farad. Discuss. (2010) 144, 411.
- [19] T. A. Vuorela, A. Cate, P. S. Niemela, A. Hall, M. T. Hyvonen, S. J. Marrink, M. Karttunen, I. Vattulainen, PLoS Comp. Biol. (2010) 6, e1000964.
- [20] X. Periole, A. M. Knapp, T. P. Sakmar, S. J. Marrink, T. Huber, J. Am. Chem. Soc. (2012) 134, 10959.



Szent-Györgyi Albert előadás-sorozat „Albert Szent-Györgyi Lectures”

Molekuláris élettudományi előadás-sorozat az ELTE TTK és az MTA TTK közös szervezésében

Szent-Györgyi Albert neve és munkássága minden magyar kutató számára példa, hiszen munkájával bizonyította, hogy hazánkban is lehet akár Nobel-díjjal elismert kutatásokat végezni. A szakterületén dolgozó kutatók többsége számára egyértelmű, hogy ő kiemelkedő magyar biokémikus és fehérjekutató volt, ezért egy élettudományi tárgyú szakmai előadás-sorozat méltán viselheti a nevét.

Szent-Györgyi Albert az Eötvös Loránd Tudományegyetem jogelődjének professzora volt 1945 és 1947 között. Mi, az egyetemen dolgozó „örökösei” szívesen látnánk, ha egyetemünk életében – a Természettudományi Kar Gömbaulájában található emléktáblán túl – a neve és szelleme gyakrabban lenne megidézve. Ezért a nevével fémjelzett előadás-sorozatot 2011-ben – a jelen írás szerzőinek kezdeményezésére létrejött Open Laboratory of Protein Science, „egy olyan, Szent-Györgyi Albert szellemiségének jegyében fogant keretrendszer, amelyet a fehérjetudomány iránt érdeklődő kutatók töltenek meg tartalommal” elindította.

Az előadás-sorozat célja, hogy a magyar kollégák és diákok világhírű kutatóktól hallhassanak a természettudományok, s ezen

belül a fehérjetudományok szépségeiről, legfrissebb szakmai eredményeiről. Eddig közel két tucat előadót hívtunk meg, közülük két nevet emelünk ki: James Spudich Lasker-díjas és Kenneth Holmes Gabor-díjas kutatók tartottak nagysikerű előadásokat. Felbuzdulva az MTA Természettudományi Kutatóközpont megalakulásán és az ELTE Természettudományi Kar szomszédságába költözésén, a „TTK²” mottó jegyében, a Perczel András által vezetett MEDinPROT akadémiai program támogatásával, most új erőre kapott az előadás-sorozat. (A 2015 első félévének előadói listáját a beszámoló végén közöljük, az előadás-sorozatról pedig a MEDinPROT honlapján (<http://medinprot.chem.elte.hu/hu/>), az ELTE és az MTA hírei között lehet olvasni.)

A két TTK és az ELTE Hallgatói Alapítvány támogatásával szeretnénk az előadás-sorozatot hosszabb távon is fenntartani, olyan hagyományt teremtve, amellyel Szent-Györgyi Albert emlékét aktív kutatóként úgy ápoljuk, hogy a világ legfontosabb molekuláris élettudományi kutatásaiból hónapról hónapra egy-egy izgalmas témát egy-egy kiváló előadó segítségével hozunk el Budapestre.

A Szent-Györgyi Albert előadás-sorozat korábbi előadói (2011 és 2014 között)

1. **William Lehman** (Boston University, USA): Structural Basis for Troponin-Tropomyosin Regulation of Muscle Contraction
2. **Tompá Péter** (MTA Enzimológiai Intézet és Structural Biology Research Center, Vrije Universiteit Brussel): Merre tart a szerkezeti rendezetlenség kutatása?
3. **Tóth Judit** (MTA Enzimológiai Intézet, Prima Primissima-díjas): Az U-DNS világból a T-DNS világba történő átmenet tettenérése enzimkinetikán keresztül
4. **Florian Hollfelder** (Department of Biochemistry, University of Cambridge): Multiple Catalytic Promiscuity: Towards Rules and Tools
5. **Sophie Jackson** (Department of Chemistry, University of Cambridge): A Tangled Problem: The Structure, Function and Folding of Knotted Proteins
6. **Csermely Péter** (Simmelweis Egyetem, Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Pathobiokémiai Intézet): Fehérjeszerkezet-hálózatok csoportjai és különleges helyzetű részei
7. **Stephen C. Kowalczykowski** (University of California, Davis): Single-Molecule Imaging of DNA Helicases and Motor Proteins
8. **John R. Helliwell** (School of Chemistry, University of Manchester, UK): Why does a lobster change colour on cooking?
9. **John Sparrow** (Department of Biology, University of York): What can we learn from the development of flight muscle
10. **Yuji Goto** (Institute for Protein Research, Osaka University): The role of supersaturation in aberrant protein aggregation
11. **Andreas Bender** (University of Cambridge, Department of Chemistry): Computational Approaches to Polypharmacology and Mode-of-Action Analysis
12. **Kenneth Holmes** (Max Planck Institute for Medical Research, Heidelberg): The structural basis of muscle contraction
13. **James Spudich** (Department of Biochemistry, Stanford University): One path to understanding energy transduction in biological systems, and where do we go from here?
14. **Lukáš Židek** (Central European Institute of Technology, Masaryk University, Brno): Molecular motions of disordered proteins and other flexible molecules probed by spectral density mapping
15. **Pósfai György** (MTA SZBK Biokémiai Intézet): Szintetikus biológia: az Escherichia coli baktérium egyszerűsítése
16. **Bob Lazarus** (Genentech Inc., San Francisco): Protein Engineering of Zymogen Activators and Protease Inhibitors: Targeting HGF/Met and BACE1



A Szent-Györgyi Albert előadás-sorozat 2015-ös meghívottjai

2015. január 21.

Harald Schwalbe (Institute of Organic Chemistry and Chemical Biology, Johann Wolfgang Goethe University, Frankfurt): Understanding dynamic layers of cellular information transfer

2015. február 11.

Gregers Rom Andersen (Department of Molecular Biology and Genetics, Aarhus University): Structural insight into the mechanism of complement activation through a hybrid approach of crystallography and small angle X-ray scattering

2015. április 8.

Stephen Mann (Professor of Chemistry, University of Bristol): System of Creation: the Emergence of Life from Non-living Matter

2015. május 6.

Toby Gibson (Team Leader, EMBL, Heidelberg): In-complex molecular switching: The need to address complexity in cell regulation

2015. május 20.

Kunos György (National Institute on Alcohol Abuse and Alcoholism, NIH): A perifériás endokannabinoid rendszer szerepe az anyagcsere-szabályozásban és azzal kapcsolatos betegségekben

2015. június 17.

Tony Kossiakoff (Department of Biochemistry & Molecular Biophysics, Univ. Chicago): Modifying biological function using conformational trapping by in vitro evolved antibodies
Az előadókat és az előadások rövid összefoglalóit a jövőben igyekszünk a teljes magyar kémikus, biokémikus és az élettudományok iránt érdeklődő kollégák számára hozzáférhetővé tenni a Magyar Kémikusok Lapjában és a Magyar Biokémiai Egyesület elektronikus folyóiratában, a Biokémiában is.

Nyitrai László

tanszékvezető egyetemi tanár, ELTE TTK Biokémiai Tanszék,

Perczel András

egyetemi tanár, az MTA levelező tagja, ELTE TTK Kémiai Intézet,

Buday László

igazgató, az MTA levelező tagja, MTA TTK Enzimológiai Intézet

Előadás-beszámoló

Harald Schwalbe (Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main):

„Understanding dynamic layers of cellular information transfer”



Harald Schwalbe a Frankfurter Egyetemen szerzett vegyész diplomát, majd 1993-ban PhD-fokozatot. Posztdoktor volt Oxfordban, Chris Dobson professzor kutatócsoportjában, utána éveket dolgozott junior professzorként az MIT-n. 2002-ben nevezték ki professzorrá a frankfurter Goethe Egyetemen, amely a világ első 100 egyeteme közé tartozik. 2003-tól 2008-ig a Biokémiai, Kémiai és Gyógyszerészeti Tanszék és a „Biomolecular Magnetic Resonance”

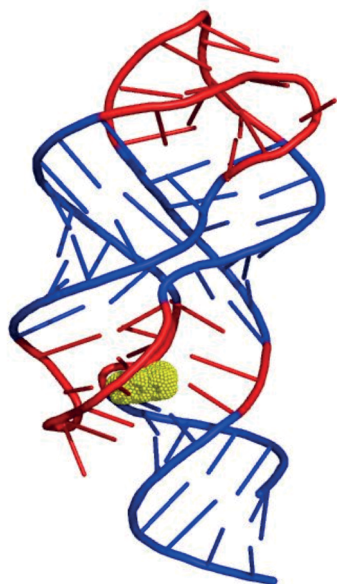
centrum (BMRZ) vezetője is volt. Jelenleg az Egyetem és a Max Planck Intézet által közösen működtetett interdiszciplináris „Cluster of Excellence Frankfurt Macromolecular Complexes” vezetőtestületének tagja, és egy több mint 30 fős kutatócsoport irányítója. 2000-ben Karl Winnacker-díjas volt, 2014-ben a Kassel Alapítvány az Év Kutatójává választotta. A BMRZ kutatási lehetőségeit jelzi, hogy jelenleg 14 folyadék- és 2 szilárd-fázisú NMR és 4 ESR spektrométert használhatnak az ő irányításával a kutatók.

Fő érdeklődési területe a fehérjék nagy felbontású szerkezet-

funkció vizsgálata, a transláció és a polipeptidlánc feltekeredése (folding), a fehérjeszerkezet dinamikája, DNS-fehérje komplexek szerkezete, az RNS-alapú riboswitch molekulák szerkezete és működése. A módszertani megközelítés elsősorban az NMR-spektroszkópia innovatív használatán alapszik, de a kémiai biológia számos új módszerét is széles körben alkalmazzák (pl. fotolabilis, fehérje- és RNS-ligandum „caged” molekulák szintézise).

A Szent-Györgyi Albert előadás keretében Schwalbe professzor két olyan kutatási területről számolt be, amely arra példa, hogy a sejtszintű információtranszfer két alapszintjére, a transzkripcióra és a translációra is jellemző a dinamikus szabályozás. Az első téma a „riboswitch”-nek nevezett RNS-molekulák szerkezetéről és működéséről szólt. Ezeket, a génkifejeződést fehérjék közreműködése nélkül szabályozó (elsősorban baktériumsejtekre jellemző), az ún. RNS-világ létrehozott bizonyítékot szolgáltató szerkezeteket a 2000-es évek legelején fedezték fel. A riboswitch egyes mRNS-ek olyan térszerkezettel bíró szabályozó része (az 5'-vég egy-kétszáz nukleotidból álló régiója, az ún. aptamer domén), amelyhez egyes metabolitok specifikusan kötődnek, allosztérikusan megváltoztatják a régió konformációját, s ezzel mintegy ki-be tudják kapcsolni az adott gén expresszióját, a transzkripció vagy a transláció szintjét.

Az előadáson egy transzkripció szintű (a *Bacillus subtilis* baktériumból származó), guaninra és hipoxantinra érzékeny riboswitch (*xpt-pbuX*) vizsgálatáról hallhattunk. Ez a szabályozó



Guanin riboswitch
(a guanint pontozott felszín
jelzi; pdb:3RKf)

elem, ha a sejtben elegendő purin található, gátolja a purinbioszintézisben szerepet játszó gének transzkripcióját az RNS-polimeráz számára transzkripció terminációs szignálként szolgáló mRNS szerkezet kialakulásán keresztül. (A terminátor-szekvencia egy önmagával bázispárosodni képes RNS régió, aminek a kialakulása után az RNS-polimeráz működése leáll és leválik a DNS templátról.) Az új eredmények azt az elképzelést vetik fel, hogy a riboswitch nem két, egymást kizáró „be- és kikapcsolt” konformációban létezik, hanem ligandumtól függetlenül e kétféle szerkezeti állapot, a „kikapcsolt” terminátor és a „bekapcsolt” antiterminátor termodinamikai egyensúlyban van egymással. (Az antiterminátor szekvencia egy alternatív bázispárosodó régió, aminek a kialakulása nem befolyásolja az RNS-polimeráz működését, tehát ha az mRNS-en ez a szerkezet alakul ki, a transzkripció tovább folyik.) A szabályozás úgy valósul meg, hogy a purin ligandum hiányában a növekvő mRNS lánc „eleje” antiterminátor tényszerkezetet vesz fel, s csak olyan lassan alakul át a stabilabb terminátor szerkezetté (mintegy kinetika csapdába esik), ami alatt az RNS-polimeráz áthalad a terminátor-szekvencián, s a gén(ek) átírása folytatódhat. Ugyanakkor purin-„bőség” esetén a ligandum-kötés hatására az aptamer-domén stabilizálódik, az antiterminátor szerkezet kialakulása visszaszorul, a terminátor tényszerkezet viszont két nagyságrenddel gyorsabban alakul ki, vég-

ső soron tehát génrepresszió következik be. Tehát a szabályozás a kétféle szerkezeti állapot dinamikáját szabályozza, a genetikai „döntést” (be- vagy kikapcsol a gén) a ligandumkötés és az RNS tényszerkezet átalakulásának (refolding) kinetikája határozza meg. Az előadás második részében egy igen izgalmas új, a szerendipitás körébe tartozó felfedezésről számolt be Schwalbe professzor (az angol „serendipity” kifejezést a meglepő, véletlen felfedezésekre használják). *In vitro* riboszómaalapú fehérjeszintetizáló rendszerek optimalizálásán dolgoztak, mely kutatás része volt a genetikai kód degeneráltságából adódó fajszintű kodon- (bázishármas) használat figyelembevétele. A szinonim bázishármasok ugyanazt az aminosavat kódolják, ennek ellenére arra a meglepő eredményre vezettek a kísérletek, hogy a különböző kodont tartalmazó mRNS-ek translációjának a kinetikája, a megszülető, azonos szekvenciájú naszcens polipeptidláncok feltekeredése és végső soron a működőképes fehérje tényszerkezete eltérő lett. A példafehérje az emberi szemlencse egyik fő komponense, a gamma-B kristallin két szinonim kodont tartalmazó változata volt. A két szerkezet különbségére 2D-NMR spektroszkópia és *in vitro* proteázrezisztencia vizsgálatok mutattak rá, miközben az azonos szekvenciájú variánsok cisztein oxidációs állapotai (diszulfid-mintázata) is eltérőek voltak. A szerkezeti különbség okaként azt feltételezik, hogy transláció lokális és globális sebessége is megváltozik a nukleotid-szekvencia különbözősége folytán, ami elsősorban a ko-transzlációs feltekeredési útvonalak (a riboszóma „szülőcsatornájából” kikerülő, az N-terminális végétől növekedő polipeptidlánc általában azonnal elkezdi feltekeredni) megváltoztatásán keresztül befolyásolja a fehérje konformációját. Ez az eredmény felveti azt a lehetőséget is, hogy a csendes mutációknak, a gének kódoló régióját érintő SNP-knek (a „snip”-ek egy nukleotid pozíciót érintő polimorfizmusok) is lehetnek a fehérjék tényszerkezeti változásán keresztül megvalósuló hatásai – ám jelenleg ilyen biológiai példát még nem ismerünk.

Nyitrai László

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Biokémiai Tanszék

Gregers Rom Andersen

(Department of Molecular Biology and Genetics, Aarhus University):

„Structural insight into the mechanism of complement activation through a hybrid approach of crystallography and small angle X-ray scattering”

A Szent-Györgyi Albert előadássorozat február 11-i előadója Gregers Rom Andersen professzor volt Dániából, az Aarhusi Egyetem Molekuláris Biológiai és Genetikai Tanszékéről. Andersen professzor kutatási témája a komplementrendszer szerkezeti biológiája. Az aarhusi laboratórium a világ egyik vezető műhelyének számít ebben a témában; ezért szerencsésnek mondhatjuk magunkat, hogy már több éve eredményes együttműködést folytatunk a dán kutatókkal.

A komplementrendszer egy kb. 40 fehérjemolekulából álló proteolitikus kaszkádszisztéma, amely a természetes immunitás egyik

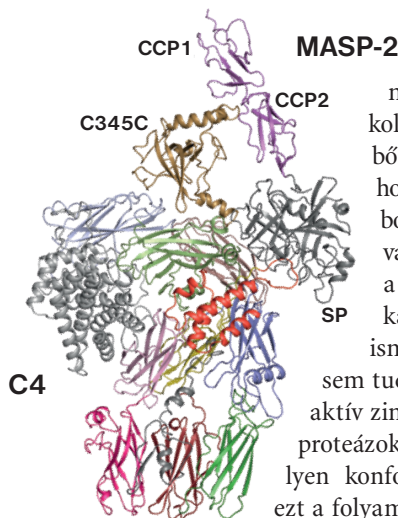
legfontosabb effektor mechanizmusát testesíti meg. A komplementrendszer mintázatfelismerő molekulái által képes felismerni a szervezetünkre veszélyt jelentő struktúrákat (pl. baktériumok, vírusok, rákos sejtek, apoptotikus sejtek), és egy proteolitikus kaszkádszisztéma révén azokat megsemmisíti, illetve eltávolítja a keringésből. A komplementrendszer az egyik legelső védelmi vonalat képezi testünkben a fertőzések ellen. A komplementrendszert még a 19. század végén fedezték fel, és ebben a magyar Fodor Józsefnek, a Budapesti Tudományegyetem Közegészségügyi Intézete professzorának, úttörő szerepe volt. A komple-



mentrendszer azóta is az immunológusok, biokémikusok és a fehérjetudománnyal foglalkozó szakemberek egyik kedvenc kutatási témája; hiszen az már önmagában is lenyűgöző, hogy egy pusztán fehérjemolekulákból álló rendszer ennyire komplex élet-tani funkciókat lásson el szabályozott módon.

A komplementrendszer kutatásának új lendületet adott a szerkezeti biokémiai módszerek (röntgenkristallográfia, NMR, elektronmikroszkópia stb.) elterjedése az utóbbi évtizedekben. Számos komplementfehérje térszerkezetét határozták meg, amiből fontos következtetéseket lehetett levonni a rendszer működési mechanizmusára nézve. Nagy kihívást jelent azonban azoknak a nagyméretű multimolekuláris komplexeknek a tanulmányozása, amelyek nem, vagy csak nagyon nehezen kristályosíthatók a flexibilis szerkezetüknek köszönhetően. Andersen professzor előadásában elsősorban ilyen komplex struktúrákról beszélt. Nemrégiben, kutatócsoportunkkal együttműködésben, megoldották a komplementaktiválás ún. lektin útjában fontos szerepet játszó MASP-2 (MASP=mannózkötő lektinhez kapcsolódó szerin-proteáz) szerin-proteáz és nagyméretű fehérjeszubsztrátja, a C4, közötti enzim-szubsztrát komplex térszerkezetét. A MASP-2, hasonlóan a legtöbb szérumban található proteázhoz, multidomén struktúrával rendelkezik. A katalitikus aktivitást hordozó szerin-proteáz (SP) doménhez több nemkatalitikus domén is kapcsolódik. A MASP-2-C4 komplex szerkezete rávilágít a nemkatalitikus domének szerepére: míg a proteáz domén a hasítandó peptidkötést tartalmazó fehérjelánchoz kapcsolódik a C4 molekulán, addig a nemkatalitikus CCP (complement control protein) domének a C4 molekula távolabbi C345C doménjével alkotnak kölcsönhatást (ábra); ezzel nagymértékben megnövelve a proteáz hatékonyságát és specificitását. A multidomén proteázok tehát specifikus funkciójukat a különböző domének együttműködése révén látják el.

Tudjuk azonban, hogy a MASP-2, hasonlóan a többi komplement proteázhoz, hatását nem izoláltan fejt ki, hanem a mintázatfelismerő molekulákkal alkotott komplexein keresztül. A mintázatfelismerő molekulák a proteázot a veszélyszignált hordozó struktúrákhoz (pl. baktériumsejt felszíne) kapcsolják, ahol a proteáz elindíthatja a sejt megsemmisítéséhez vezető kaszkádfolya-



matot. A mintázatfelismerő molekulák (C1q, mannózkötő lektin: MBL, ficolinok) globuláris doménekből és az azokhoz kapcsolódó hosszú kollagénszerű szárból állnak. Kevés információval rendelkezünk arról, hogy a szerin-proteázok hogyan kapcsolódnak a mintázatfelismerő molekulákhoz, és azt sem tudjuk, hogy a kezdetben inaktív zimogén formában jelen lévő proteázok hogyan aktiválódnak, milyen konformációváltozások kísérik ezt a folyamatot. Andersen professzor előadásában ismertette legújabb eredményeit a lektin út iniciációs komplexének szerkezetével és az aktiválódás mechanizmusával kapcsolatban. A vizsgált iniciációs komplex egy tetramer felépítésű MBL molekulából és egy MASP-1 proteáz dimerből állt. A komplex szerkezetének tanulmányozására kisszögű röntgenszórást és elektronmikroszkópiát alkalmazott. Eredményei alapján azt a következtetést vonta le, hogy az MBL-MASP komplexek aktiválódása a komplexek között történik, amikor azok egymáshoz közel lekötnének az aktivátor felszínére és a szomszédos komplexeken lévő szerin-proteázok kölcsönösen felaktiválják egymást. E mechanizmus szerint a proteázok aktiválódásához nincs szükség nagymértékű konformációváltozásra a komplexeken belül. Ez a mechanizmus éles ellentétben áll a komplement klasszikus útjának hasonló felépítésű iniciációs komplexének, a C1 komplexnek, az aktivációs modelljével, ahol a feltételezés szerint, a zimogének a komplexen belül nyerik el aktív szerkezetüket jelentős konformációváltozás kíséretében. Jelenleg nagy verseny zajlik a komplement kutatással foglalkozó szerkezeti-biokémia laboratóriumok között a C1 komplex szerkezetének és aktivációs mechanizmusának felderítésére.

Gál Péter

MTA TTK Enzimológiai intézet

Májusi előadások

2015. május 6. szerda, 16.00

Toby Gibson (Heidelberg, Németország): „In-complex molecular switching: The need to address complexity in cell regulation”



2015. május 20. szerda, 16.00

Kúnos György (Bethesda, Amerikai Egyesült Államok): „A perifériás endokannabinoid rendszer szerepe az anyagcsere-szabályozásban és azzal kapcsolatos betegségekben”



Az előadások helyszíne: MTA TTK Kisterem • 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

Sok tehetség kiszorulhat a felsőoktatásból

Interjú Lovász Lászlóval, az MTA elnökével¹

A kormány társadalmi viták keresztüzében a középfokú és felsőfokú oktatás jelentős átalakítására készül. A felsőoktatási stratégia véleményezésében november óta a Magyar Tudományos Akadémia is részt vesz. Lovász László, az MTA tavaly megválasztott elnöke az év elején több észrevételt is megfogalmazott a felsőoktatási koncepcióval kapcsolatban. A jeles matematikus szerint annak, hogy Magyarország hiányzik a nemzetközi élvonalból, nem csupán pénzügyi okai vannak.

FOTÓ: MTA HU



– Akadémiai oldalról többen is nyomatékos állásfoglalásokat tettek az iskolázottság védelmében: megjelent egy tanulmány, Ön pedig interjút adott a Népszabadságnak. Miért volt ez az egyidejű megnyilvánulás?

– Ismerem a Közgazdaságtudományi Intézet tanulmányát, de a megnyilvánulásunk egymástól független volt. Én annak kapcsán nyilatkoztam, hogy a felsőoktatással foglalkozó koncepció az ősz során készült el, és azt az Akadémia véleményezte. Úgy gondolom, hogy egy ilyen fontos kérdésben szükséges, hogy a széles közvélemény is értesüljön azokról a vitákról, amelyek az átalakítással kapcsolatban zajlanak. Hozzáteszem: alapvetően örülök annak, hogy elkészült a felsőoktatási koncepció. Nem kritizálni akarunk, egyszerűen csak minél szélesebb körű egyeztetést folytatni a felsőoktatás jövőjéről. Fenntartom, hogy több diplomásra lenne szükség, és jelentősen emelni kellene a felsőoktatás finanszírozását – a GDP 0,5 százalékáról legalább az 1 százalékára – ahhoz, hogy Magyarország hosszú távon versenyképes legyen.

– Korábban említette, hogy egy hétvégéjük volt a stratégia véleményezésére. Múlt hétfői kiállítását követően pénteken egyeztettek a felsőoktatási államtitkárral. Ez mennyiben tekinthető előrelépésnek?

– Én mindenképpen annak tekintem. Megállapodtunk abban, hogy rendszeresen fogunk konzultálni, hiszen az Akadémiának a felsőoktatás több szempontból is létfontosságú: egyrészt az MTA tagjainak többsége oktat a felsőoktatásban, másrészt onnan jön az utánpótlás is, amely 10–20 év múlva meghatározza helyünket a nemzetközi tudományos versenyben.

– Önök szerint melyek a felsőoktatási koncepció leginkább egyeztetésre szoruló pontjai?

– Az elvi célkitűzések tekintetében nincs különösebb vitánk a minisztériummal. Vannak megvitandó kérdések, például a kancelláriarendszerrel kapcsolatosan, amelynek működésére számos országban találunk példát, és azt látni, hogy a kancellár mindenhol meghatározott hatáskörrel rendelkezik, azaz csak nagyon korlátozottan folyik bele az egyetemek szakmai munkájába. Ezen a ponton örömmel láttam volna több biztosítékot arra, hogy az egyetemek szakmai vezetése megőrizheti mozgásterét. Különösen, hogy nálunk komoly átalakításokat kell lemenedzselni, melyekben félé, hogy főként a fenntartói szempontok, esetleg lobbierdek fognak dominálni, tekintve, hogy a felsőoktatás állami finanszírozása nem nő.

– Mennyiben jelent garanciát, ha sikerül az intézmények szakmai önállóságát formálisan biztosítani?

– Nehéz élesen szétválasztani a pénzügyi és szakmai vonatkozású döntéseket, különösen olyan kérdésnél, hogy milyen kutatások, milyen szakok vagy képzési formák kapjanak támogatást. Megalapozott az intézmények sokat emlegetett profiltisztítása, de valójában minden azon múlik, hogy adott esetben mennyire tud a rektor és a kancellár együttműködni.

– Mi a véleményük a felsőoktatási intézmények kategorizálásáról tudományegyetemek, alkalmazott tudományok egyetemei, azaz főiskolák, valamint közösségi főiskolák szerint?

– Indokolt a struktúraváltás, hiszen a közösségi főiskolák – amelyekre szintén van külföldi precedens – képzési célja jól körülírható, a helyi munkaerőpiac igényeinek megfeleltethető, és elválasztható az egyetemi szintű képzésektől. A tartalmi kérdésekről is érdemes lenne párbeszédet folytatni, hiszen a nyelvtudás vagy a jogi és közgazdasági alapismeretek, melyek a mai középiskolákban természetes módon nem sajátíthatók el, okvetlenül szükségesek akár a közszférában, akár a vállalkozói szférában való munkavállaláshoz. A meglévő szakok, akár gazdasági képzések átalakításakor érdemes lenne ezt is figyelembe venni.

– Ön régebben felvetette az egyéves alapozó év gondolatát is, bár ez nincs benne a koncepcióban.

– Tapasztalataim szerint a tizennyolc éves érettségizettek nagy része nem tudja még, hogy mi akar lenni, és azt sem, hogy mit is takar egy-egy szak valójában. Nem véletlen, hogy az amerikai oktatási rendszerben az első egyetemi évben egy általános képzésben vesz részt a diák. Eközben ismerkedhet a különböző szak-

¹ A Hetek honlapján megjelent írás (http://www.hetek.hu/interju/201501/sok_tehetség_kiszorulhat_a_felsőoktatásból) utóközlése a szerkesztőség szíves engedélyével.



területekkel, és a következő évben választ szakot, de az sem zárólag egy szűk területre korlátozódó képzés. Az egész rendszer sokkal átjárhatóbb, amit a magam részéről szimpatikus megoldásnak tartok.

– A hazai rendszer átalakítása miként illeszkedik a bolognai rendszerbe? Az elitképzés elkülönítése mennyire garantálja a tudósutánpótlást?

– Úgy gondolom, hogy bármilyen változtatás üdvözlendő, ami a jelenlegi rendszert sokszínűbbé, nyitottabbá teszi, esetleg több lehetőséget ad diákok nemzetközi cseréjére. A bolognai rendszer gondolata nem rossz, de a bevezetése átgondolatlan volt. Értelmesebb lenne, ha a hároméves alapszak után akár pályamódosítás is lehetséges lenne, és a képzés nem csupán a korábbi ötéves szakok kettébontásáról szólna. Egy elméleti fizikus például miért ne mehetne át mérnökképzésre?

Ami a tudósutánpótlást illeti, ha valóban leszűkítik az érettségizők, illetve a felsőoktatásba felvettek számát, akkor nagyon sok tehetséges fiatal kiszorul a felsőoktatásból, és az egyetemi elitképzésnek is jóval kisebb lesz a meritése. Az viszont üdvözlendő, hogy a jövőben a kutatási támogatásokat nem egyetemek, hanem kutatócsoportok kapnák, mert így a diákokat is nagyobb számban lehetne bevonni a kutatásokba.

– A minőségi felsőoktatáshoz pénz kell, de nálunk az állam szűkmarkú, az állampolgároknak pedig nincs pénze. Hogyan lehet ilyen helyzetben a nemzetközi élvonalba kerülni?

– Egyik oldalról politikai akarat kérdése, hogy mennyit szán az állam az oktatásra. Az Egyesült Államokban, ahol fizetős felsőoktatás van, az egyetemek bevétele egyenlő arányban oszlik meg a tandíjak, az adományok és a tudományos kutatások támogatása között. Nálunk ez utóbbit lehetne leginkább növelni. Hozzáteszem, a nemzetközi tudományos vérkeringésbe való bekerülésünket nem csupán pénzügyi, hanem adminisztratív vagy akár nyelvi nehézségek is akadályozzák. Ilyen az akadémiai kutatók közalkalmazotti státusza, a habilitációs procedúrák vagy a magyar nyelven zajló mester- és doktori képzések. Mindennek következtében a diákjaink és oktatóink jelentős számban járnak ki külföldre, viszont kevés külföldi jön hozzánk. Az elvándorlás

megállítása pedig nem kis szerepe lehetne olyan támogatóknak, mint az MTA pályakezdő és arra érdemes kutatókat segítő *Lendület* programja.

– Mi lesz vajon a bölcsész- és társadalomtudományok sorsa, amelyeket a felsőoktatási fejlesztési stratégia meg sem említt?

– Meggyőződésem, hogy a bölcsész- és társadalomtudományok nélkülözhetetlenek az európai integráció folyamatában is, a különböző kultúrájú, jogi és gazdasági berendezkedésű országok együttélésében. Nehezíti a helyzetet, hogy a humán tudományok kevésbé rendelkezhetnek objektív minősítési kritériumokkal, így teljesítményük megítélésében könnyebben érvényesülhetnek politikai vagy egyéb szempontok is.

– A statisztikák szerint a humán végzettségűek elhelyezkedési mutatói nem rosszabbak, mint a reál végzettségűeké. Ön azt mondja, hogy sokkal több diplomásra lenne szükség, és a mai világban való boldoguláshoz az érettségi alapkövetelmény. A szakmunkások esetében nem lenne elég egy színvonalas általános iskolai képzés is?

– A technológiai fejlődés olyan gyorsan halad előre, hogy az érettségit nélkülözhetetlennek tartom. Ez biztosít olyan általános ismereteket és képességeket, amire aztán megfelelő életkorban a korszerűsíthető szaktudás felépíthető. Informatika, nyelvtudás, pénzügyi és egyéb alapismeretek nélkül a szakmunkások sem tudnak boldogulni, a megszerzett specifikus tudás ugyanis rohamtempóban avul el.

– Az általános tudás még a felsőoktatásba belépőknél is hiányos...

– Igen, még az ELTE-n is azt lehet látni, hogy nem a fiatalok képességeivel, hanem a felkészültségével van baj. Nekem például óriási szerencsém volt, mert a Fazekas Gimnázium matematika tagozatos osztálya rendkívül inspiráló közeget jelentett. A matematikaoktatásnak hazánkban komoly hagyományai vannak, amelyekre érdemes lenne támaszkodni. Módszertani fejlesztéseket az Akadémia is támogat, de az oktatás színvonalát, a tudás értékét alapvetően a tanárok megbecsültsége határozza meg.

Makki Marie-Rose

Az év ismeretterjesztő tudósa – 2014



PONORI THEWREWK AURÉL

A Tudományos Újságírók Klubja által alapított díjat Venetianer Pál és posztumusz Ponor Thewrewk Aurél csillagász nyerte el. Ponor Thewrewk Aurél, többek között, feltárta



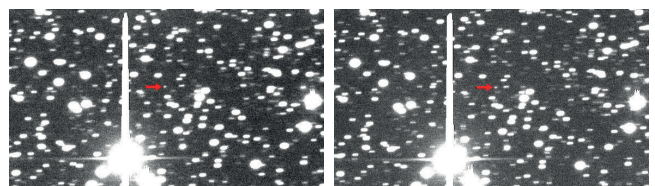
VENETIANER PÁL

a Bibliában említett

csillagászati vonatkozásokat, történelmi események időpontját határozta meg az égbolton megfigyelt jelenségek bekövetkezésére alapozva.

Venetianer Pál a molekuláris biológia kutatóprofesszora, a Szegedi Biológiai Központ egyik alapítója. A génszétválasztási technikákat elsőként alkalmazta munkatársaival Magyarországon. „A génmódosítás elleni érvek sejtelmeken, spekulációkon, gazdasági és politikai megfontolásokon alapulnak. Semmiféle tu-

dományosan bizonyított adat nincs ilyen negatív hatásról, jelenlegi biológiai ismereteink alapján semmi okunk nincs feltételezni, hogy ilyen hatás létezhessen” – nyilatkozta a közelmúltban, hangsúlyozva, hogy „az idegenkedés hátterében állhat a genetikai ismeretek hiánya, a mesterséges dolgoktól való elzárkózás, a technikai fejlődés egyes vonatkozásainak elutasítása, illetve a gazdasági és a politikai ellenérdek.” Nevét mostantól a 313116 Pálvenetianer kisbolygó viseli.



A Pálvenetianer a nyílak alapján azonosítható. A kisbolygót Sárnecky Krisztián fedezte fel (SK szíveségéből)

Hírek és Kémikusok

Ferenc pápa

Habemus papam? Habemus chemia!

Ez a hír járta 2013. március 13-án, amikor felszállt a fehér füst a római Sixtus-kápolna kéményéből azt jelezve a világnak, hogy XIV. Benedek pápa lemondása után az argentin bíborost, Jorge Mario Bergogliót pápává választották. Ugyan sok internetes forrás szerint Ferenc pápának MSC-diplomája van kémiából, a hivatalos vatikáni életrajza „csak” vegyésztechnikusi oklevelet említ.

Jorge Mario Bergoglio 1936. december 17-én született Buenos Aires egyik peremkerületében, Floresben. Édesapja Mario José Bergoglio volt, akinek családja 1929-ben költözött el Olaszország Piemont Asti megyéjéből, Benito Mussolini fasiszta államberendezkedése elől menekülve. Édesanyja, Regina María Sívori már Buenos Airesben született, de családja szintén piemonti gyökérű volt. Az édesapa könyvelőként dolgozott, míg felesége napjait öt gyermekük nevelése töltötte ki: közülük Jorge volt a legidősebb.

A későbbi szentatya a ma is működő Buenos Aires-i Escuela Nacional de Educación Técnica Nº 27 Hipólito Yrigoyen szakközépiskolában szerzett vegyésztechnikusi képesítést. Végzés után az argentin fővárosban, a Hickethier-Bachmann Laboratorynál talált állást. Bergoglio munkája elsősorban élelmiszerek kémiai analízisére összpontosított. Közvetlen főnöke a paraguayi születésű Esther Balestrino de Careaga kémikus volt, aki harcos kommunista nézeteket vallott, ennek ellenére beosztottjával jó barátok lettek.

Bergoglio 21 éves korában súlyos tüdőgyulladást kapott, emiatt műtéttel eltávolították tüdejének egy részét. Ekkor már papnak tanult, s 1958. március 11-én belépett a jezsuita rendbe. A San Miguelben lévő Colegio de San Joséban 1963-ban filozófiából, majd 1970-ben teológiából szerzett diplomát.

Az iskola Buenos Airesben, ahol Ferenc pápa vegyésztechnikusi képesítést szerzett (2014-es fénykép)

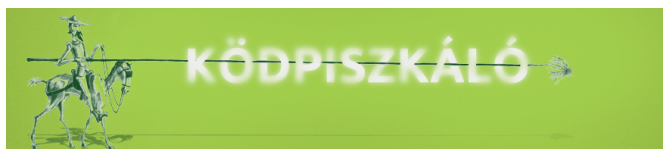


Az argentin történelem sötét napjaiban volt főnöke, Esther Balestrino egy eltűnt embereket kereső szervezet aktivistája lett, ezért 1977. december 8-án fegyveresek több társával együtt elrabolták őt a Buenos Aires belvárosában lévő Santa Cruz templomból. Holttestét repülőgépről a tengerbe dobták, de a partra sodródott, s később büntügyi laboratóriumi eszközökkel azonosították. Ekkoriban Jorge Bergoglio már Buenos Aires érseke volt, ő engedélyezte, hogy Esther Balestrino maradványait a Santa Cruz templom kertjében temessék el.

Ferenc pápa megválasztása után sem felejtette el természettudományos elkötelezettségét. Ennek egyik jele, hogy a Vatikán környezetvédelmi kérdésekben az utóbbi időkben egyre határozottabb véleményt fogalmaz meg, s a katolikus egyház útmutatásaiba egyre inkább beépülnek a fenntartható fejlődés szempontjai is. Ennek része volt 2014 májusában a Pápai Tudományos Akadémia által, 36 jelentős tudós és egyházi vezető részvételével szervezett „Fenntartható emberiség, fenntartható természet: a mi felelősségünk” konferencia is, amelyen a Science tudományos folyóirat beszámolója szerint Ferenc pápa minden egyes résztvevővel magánbeszélgetéseket is folytatott. A közvélekedés szerint a katolikus egyháznak igen fontos szerepe lehet a környezetvédelmi problémák társadalmi kezelésében.

Bergoglio kedveli a labdarúgást, mindig is a San Lorenzo de Almagro klub szurkolói közé tartozott. Sajnos, arról nem készült feljegyzés, hogy a 2014-es német-argentin világbajnoki döntőt elődje, XIV. Benedek, vagyis a német Joseph Aloisius Ratzinger társaságában tekintette-e meg.

Lente Gábor



Gyógyszerekkel, gyógynövényekkel, gyógyítással kapcsolatos tévhitekről érthetően

Csopor Dezső és csapata évek óta nagy sikerű blogot működtet Ködpiszkáló címmel a Facebookon, hogy a természettudományos tudatlansággal felvegyék a harcot és széles körű felvilágosító munkát folytassanak a rohamosan terjedő, népszerű áltudományos nézetekkel, módszerekkel, szerekkel, kezelésekkel szemben. A csapatot sikerült megnyernünk, hogy ezentűl lapunkban önálló rovattal jelentkezzenek. Bemutató cikkükben arról írnak, véleményük szerint mi indokolja rovatuk létjogosultságát. A jövőben rendszeresen jelentkező híreik alapján olvasóink személyes tapasztalataikkal is megítélhetik ennek megalapozottságát. Jó olvasást!

Molekuláris rasszizmus, szintetikumallergia

A focihoz mindenki ért, de legjobban talán az, aki soha életében egy egyeneset sem rúgott a labdába. Persze, ez nem csak a labdarúgásra érvényes: saját szakmája, hivatása kapcsán valószínűleg mindenki megtapasztalhatta, hogy a kibicek (akiknek, mint tudjuk, semmi nem drága) általában tájékozottabbnak és magabiztosabbnak tűnnek, mint azok, aki tisztában vannak tudásuk korlátaival.

Ez a közös élmény hozta össze a ködpiszkáló blog szerzőit, akik, bár különböző munkahelyeken dolgoznak és különböző végzettségűek (gyógyszerész, vegyész, biológus egyaránt van közöttünk), rendszeresen szembesülnek a gyógyszerekkel, gyógynövényekkel, gyógyászzal kapcsolatos tévhitekkel. A blog létrehozásával az volt a célunk, hogy a hihetetlen tempóban, vírusként terjedő tévhitekkel szemben szerény ellenpontot képezzünk azoknak, akiknek füle érzékeny a kritikus, megfontolt hangokra is. Mert sajnos az a helyzet, hogy a fent említett témákkal foglalkozó írások zöme – csak szakembereknek szóló tudományos cikkeket leszámítva – tévedéseket, csúsztatásokat tartalmaz. Olyan, jól hangzó állításokat, amelyek kielégítik az emberek vágyait („Edd ezt a gyógynövényt, és 2 hét alatt 10 kilót fogysz!” „5 házi recept a rák gyógyítására” és a többi, és a többi). Nem népszerű dolog a racionális tények alapján kiábrándítani azokat, akik hinni szeretnének egy-egy csodaszerben (amely a gyártón kívül senki hasznát nem szolgálja), de hisszük, hosszú távon lehet haszna a tevékenységünknek.

Persze, csodák nincsenek, a lakosság általános attitűdjének gyors megváltoztatása már csak azért sem lehetséges, mert annak gyökerei igen mélyre nyúlnak. A tévhitek térhódításának oka ugyanis a természettudományos műveltség alacsony szintje. Magam is gyakran tapasztalom, hogy érettségizett, tehát kémiát és biológiát elvileg középiskolában is tanult emberek a szervezetük működésének alapvető biológiai, kémiai törvényszerűségeivel sincsenek tisztában. Ha emlékezne arra, amit a savakról és lúgokról, pufferekről, a szervezet sav-bázis háztartásáról tanult, vajon elhinné-e, hogy napi egy-két kapszula beszédével lúgosítani tudja a szervezetét? Nyilvánvalóan nem. A tudás hiányának azonban ennél súlyosabb következményei vannak: az ismerethiány olyan tudományellenes attitűdöt alakít ki egyesekben, amely rendkívül fogékonyra teszi őket mindarra, ami a modern tudomány ellenében definiálja magát: legyen az módszer, szer, vagy bármiféle ködös teória.

Különösen nagy a gyanakvás a modern vegy- és gyógyszer-

iparral kapcsolatban. A jelenség talán a molekuláris rasszizmus¹ kifejezéssel írható le a legjobban: egyesek pusztán szintetikus eredetük okán tartanak rossznak, veszélyesnek bizonyos vegyületeket. Ezzel együtt persze a természetes eredetű vegyületeket automatikusan pozitív tulajdonságokkal (természetazonos, biztonságos) ruházzák fel. Pedig, mint a kémiahoz értők ezt jól tudják, a kettő közti határ koránt sem ilyen könnyen meghúzható...

Az egyre terjedő jelenség egyik magyarázata az lehet, hogy a hétköznapiakban használt termékekbe (élelmiszerekbe, háztartási tisztítószerbe) olyan sebességgel épülnek be a vegyipar újabb és újabb „csodái”, hogy az sokakban averziót kelt. És talán nem véletlenül: a gyorsabb hatású vízkőoldás, a még selymesebbé tevő kézkrém előállítás érdekében olyan adalékokat alkalmaznak a gyárak, amelyek életünket ugyan kényelmesebbé tehetik, de tulajdonképpen jól meglennénk nélkülük is. Nagyon nehéz megtalálni az egyensúlyt a technikai fejlődéshez szükséges termékfejlesztés és a szükségtelen, vélt (valójában nem létező, hanem inkább generált) fogyasztói érdekeket szolgáló, az elérhető haszonnál több környezeti kárt eredményező kutatás-fejlesztési tevékenység között. Ha az átlagfogyasztó attitűdjét vizsgáljuk, úgy tűnik, ez nem is sikerült.

Vannak fogyasztók (a tudatosabb fajta), akik nem utasítják el *ab ovo* a kemikáliákat, de ha lehetséges, a környezetet kevésbé terhelő termékeket vásárolnak. Nem biztos ugyanis, hogy a lakás tisztán tartásához 27 különféle tisztítószerre van szükség; sok minden megoldható a jó öreg ecettel. És abban sem biztosak, hogy szükségük van a 4 hétig friss bejglire vagy az ilyen-olyan ízű, gyümölcsöt sose látott szörpökre. Ugyanakkor indokolt esetben fenntartás nélkül beveszik a kémiai úton előállított fájdalomcsillapítót, magukra kenik a csúnya szintetikus anyagokat is tartalmazó arckrémeket.

Tény, hogy az élelmiszer- és vegyipar olyan anyagokat is felhasznál, amelyek nélkül jól meglennénk. Ki gondolná például, hogy a „hagyományos, házi” savanyúságokat nem lehet elkészíteni mesterséges édesítőszer nélkül? (A boltokban, piacokon kaphatók alapján ez lehet a benyomásunk...) Az sem feltétlenül szükséges, hogy a tusfürdőnk a tavaszi rét minden illatában illatozzon, hiszen az illat a fürdővízzel együtt rövid úton úgyis a lefolyóba kerül... Bár vannak vitatott biztonságosságú összetevők, a

¹ A molekuláris rasszizmus kifejezés Gaál Tamás (az University of Wisconsin-Madison Bakteriológiai Intézetének kutatója) leleménye.



probléma alapvetően nem az ízért/illatért/állagért/stb. felelős vegyi anyagokkal van, hanem azok szükségtelen felhasználásával. Nem hinném, hogy reális esély lenne arra, hogy a kereskedelemben kapható tömegtermékek összetételét *valóban racionálisan* alakítsák ki: az esetek zömében a gazdaságossági és marketing-szempontok, vélt vagy valós fogyasztói igények túlzott figyelembevételével készülnek a receptúrák.

Mindezek ismeretében nem meglepő, hogy sokan, „némileg” túlreagálva a helyzetet, a fürdővízzel együtt a gyermeket is kiöntve, a molekuláris rasszisták táborát gyarapítják. Csak 100 százalékban természetes anyagokat használnak, C-vitaminból is csak a természetes eredetűt hajlandóak bevenni, és akik igazán komolyan veszik az elveiket, a lázukat is inkább fűzfateával csilapítják, mint lázcsillapító gyógyszerrel. Több indokot fel tudnak hozni a természetes mellett és a mesterséges anyagok ellen. Egyesek szerint a természetes vegyületek hatásosabbak, ártalmatlanabbak, a szintetikusak hatástalanok, vagy éppenséggel mérgezőek (erről majd máskor értekezünk). Mások viszont azsal érvelnek, hogy a szintetikus azért veszélyes, mert allergizál, sőt, előfordulhat, hogy valaki az összes szintetikus anyaggal szemben allergiás. Mi igazolhatná jobban a mesterséges anyagok ártalmas voltát, mint ez a tény? Az interneten számos meggyőző írást olvashatunk ezzel kapcsolatban: *Nekem van egy nagyon érdekes születési betegségem: szintetikumallergiával születtem. Ami az jelenti, hogy semmiféle szintetikus anyag nem juthat be a szervezetembe, mert az végzetes lenne számomra. Azt, hogy ez valójában szintetikumallergia, csak 18 éves koromban derült ki, egészen addig gyógyszerallergiákat állapítottak meg nálam. Gyakorlatilag minden gyógyszerre allergiás vagyok. (...) Arra na-*

gyon vigyáztam, hogy ne jusson semmiféle szintetikum a szervezetembe olyannyira, hogy még a tinédzserkori italozásomat is mindig házi borból és pálinkából kellett megoldanom.

Az egész jól hangzó elmélet ott bicsaklik meg – de nagyon! –, hogy *ilyen széles körű allergia egyszerűen nem létezik*. Ilyen diagnózist (ti. hogy valaki az összes gyógyszerre és/vagy szintetikus anyagra allergiás) épeszű szakember nem állapít meg, és nem csak azért, mert erre diagnosztikai lehetőség sincs. Az allergia (az immunrendszer túlzott reakciója olyan anyagokra, amelyek normális körülmények között semmilyen választ nem váltanak ki a szervezet részéről) ugyanis meghatározott kémiai szerkezetű anyagokkal szemben alakul ki. Ezek az „allergének”, amelyek köre meglehetősen széles, s amelyek zöme egyébként természetes anyag (pollen, spóra, por, szőr, rovarméreg, fém, atkák stb.), de egy sor gyógyszer is megtalálható az ismert allergének között. Egyéni adottság kérdése, hogy ezek közül ki melyikre érzékeny. Olyan természetesen nem fordulhat elő, hogy valaki az összes szintetikus vegyületre allergiás, mert az az illető azonnali halálát jelentené. Már csak azért sem lehetséges ez, mert a szintetikus anyagok és a természetes vegyületek között elég nagy az átfedés (sok a szerkezetileg rokon anyag, és számtalan vegyülettel természetes és szintetikus eredetűként is kontaktusba kerülünk), ezért a szintetikumokra (*en bloc*) allergiás a természetes anyagokra is, azaz a Földön található összes anyagra érzékeny lenne. Szerencsére, szervezetünk tökéletesebb működésű annál, hogy sejtjeink különbséget tegyenek, s indokolatlan immunválasszal reagáljanak minden szintetikus anyagra. Ilyenre csak a „gondolkodó” ember képes...

Csupor Dezső

Magyarország folyói helyrejönnek a vörösiszap-katasztrófa után*

A biztonsági intézkedések kordában tartották a katasztrófát

Négy évvel a magyarországi katasztrófális vörösiszap-ömlés után az érintett Torna-Marcal folyórendszer iszapjának geokémiai jellemzői azt mutatják, hogy a remediációs eljárás sikeresen korlátozta a hosszú távú környezeti hatásokat.

A vörösiszap a bauxitból történő alumíniumgyártás Bayer-eljárásának a mellékterméke. Meglehetősen lúgos és erősen mérgező arzént és vanádiumot is tartalmaz. Finomszemcsés szerkezete miatt az emberi egészségre is ártalmas, légzési és kardiovaszkuláris problémákat okozhat, valamint igen mobilis vizes közegben.

2010 októberében Magyarország nagy ipari katasztrófának volt szemtanúja, amikor az ajkai tározó fala megrepedt és 1 millió köbméter erősen lúgos bauxittörmelék ömlött ki. A beomlás – ami a történelem során a legnagyobb környezeti vörösiszap-terhelést jelentette – 10 halálhoz és 120-nál is több sérüléshez vezetett, valamint nagy területen szennyezett szántóföldeket.

Nemzetközi nyomásra módosították az EU vegyiparral kapcsolatos törvényeit, mivel az anyag nem esett a Seveso II direktíva hatálya alá. A magyar hatóságok kiterjedt ellenlépéseket tettek; 38 milliárd forintot (98,5 millió font) fordítottak a károk elhárítására, ami magában foglalta az újjáépítést, a szennyezőanyag eltávolítását és a savas semlegesítést. Viszont – tekintve az ömlés eddig nem látott mértékét – a hiba rövid és hosszú távú hatásai meglehetősen bizonytalanok voltak.

Will Mayes és munkatársai (University of Hull, Nagy-Britannia) megmutatták, hogy az alkalmazott remediációs lépések sikeresen korlátozták az ömlés hatását a környező folyókra. 2013-ban az ömlés helyétől lefele az iszapból vett minták elem- és részecskeméret-analízise azt mutatta, hogy a vörösiszap karakterisztikus geokémiai jellemzői már nem mutathatók ki, a katasztrófa utáni állapottal ellentétben, és ez a csökkenés a beavatkozásoknak köszönhető.

„Az iszap a folyórendszerek egészségének igen jó indikátora – ha vannak szennyezők, akkor azok általában feldúsulnak benne” – mondta Mayes. „Legújabb méréseink azt mutatták, hogy az anyagnak semmi hosszú távú hatása nincs a folyórendszerre [...] szerencsére, igen gyors volt a felépülés.” Azt is sejtette, hogy a jövőben a hasonló tárolók környezeti hatásainak menedzseléséhez igen hasznosak lehetnek a mostani adatok.

„Véleményem szerint a legfontosabb következtetés a tanulmányból az, hogy [...] a jól szervezett emberi beavatkozás és a természet önregeneráló képessége együtt még az ajkaihoz hasonló súlyos környezeti katasztrófát is semlegesíteni tudja” – fűzte hozzá Szépvölgyi János, aki a katasztrófa idején irányította a helyreállítási munkákat koordináló szakmai bizottságot.

Mayes csoportja most az alumínium- és acélgyártás melléktermékeiből próbál hasznosítható anyagokat kinyerni, hogy csökkenthessék az elsődleges nyersanyagok használatát.

Fordította: Matyuska Ferenc

* A Chemistry World (2014) 11, 12. oldalán megjelent cikk fordítása.



Braun Tibor

■ ELTE Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ

Mao elnök által kezdeményezett maláriaellenes gyógyszerkutatás

Az artemizinin felfedezése

Kémiai múlt, biotechnológiai jelen és jövő

Malária a világban

Az emberek életét évezredek óta veszélyeztető malária oka a *Plasmodium falciparum* vörösvérsejtbeli szaporodása a moszkítószúnyogok terjesztésével. A malária tüneteit Kínában már Kr. e. 2700 körül leírták a „*Huang Di nei jing*”, a „*Sárga Császár belső könyvé*”-ben, de a *Plasmodium* parazitát Charles Louis Alphonse Laveran francia katonaeorvos fedezte fel egy maláriás beteg vérében 1880-ban. Laveran ezért a felfedezésért 1907-ben Nobel-díjjal tüntették ki. A kezdetben a kína (Cinchona officinalis L.) kéregből izolált kinin bizonyult a legeredményesebb maláriaellenes gyógyszernek, de az idők folyamán a *Plasmodium* törzsekben kininrezisztencia alakult ki. A malária elsősorban a trópusi országokat sújtja. A WHO adatai szerint napjainkban még mindig 3,3 milliárd ember van potenciálisan kitéve a megbetegedésnek a világ 109 országában [1].

Eredet és történelmi előzmények

A „négyek bandájának” később elnevezett hatalmi együttes 1974–76-ban uralta Kínát és a Mao által indított kínai kulturális forradalmat. A négyek legismertebb tagja Csiang Csing, Mao harmadik felesége, valahai sanghaji színésznő, társai Csang Csun-csiao, a teoretikus, Jao Ven-jüan, a propagandista, a média abszolút ura és Vang Hung-ven, előzőleg biztonsági őr egy textilgyárban. A négyek alapvetően antiintellektuális, a kutatókkal és műszakiakkal szembeni ellenséges nézeteket vallottak.

A négyek bandájának tevékenysége folytán és a kulturális forradalom társadalmi légkörében Mao Kínája nagymértékben elszigetelődött a fejlettebb világtól, és ebből természetesen a tudományos kutatás sem képezhetett kivételt. Így például Kínában hozzáférhetetlenné váltak a tudományos kutatáshoz többek között nélkülözhetetlen külföldi könyvek és folyóiratok.

Az „523-as projekt” és az artemizinin felfedezése

Valószínűleg Mao hosszú menetelésből származó számos emléke és a vietnamiak, különösen a legendás hírű Giap tábornok maláriával kapcsolatos segélykérései hatására a kínai kormány 1967. május 23-án eldöntötte az „523-as projekt”-nek elnevezett maláriakutatási program létrehozását. Az 523 május (5. hónap) 23-át jelenti. Koordinálására Csou En-lai akkori miniszterelnököt, végrehajtására az általa személyesen felügyelt, körülbelül 500 kutatóból álló „523 vezető csoportot” jelölték ki.

Szigorú titkosítása révén a projekt működése már eleve patológiai körülmények között zajlott úgy társadalmi, mint tudományos vonatkozásban. Ennek ellenére, valamilyen rejtélyes belső mechanizmus következtében, a tudományos kutatás egyik, egyébként szükséges és nélkülözhetetlen velejárója, a tudományos publikálás egy sajátos formája az „523-as projekt” esetében is kialakulhatott, így mély titkossága ellenére is visszagöngyölíthető a kutatás története. A projekt fő feladata „új maláriaellenes gyógyszerek felfedezése [volt] a malignus malária kezelésére trópusi területeken”. A projekt vezetése két fontos kutatási irányt jelölt meg: új, maláriaellenes gyógyszerek szintézisét (ezzel itt nem foglalkozunk), illetve a hagyományos kínai gyógyászatban évszázadok óta használatos malária elleni növényi és más eredetű szerek vizsgálatát.

A projekt keretében több mint 2000 hagyományos kínai gyógynövényből ajánlott receptet vizsgáltak meg, és úgy találták,



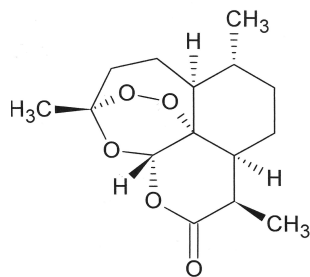
1. ábra. Az *Artemisia annua* növény (egynyári üröm) [3]

hogy 640-nek lehet valamilyen maláriaellenes hatása. Maláriás rágcslókon végzett vizsgálataik szerint 200 gyógynövény és ezek 380 kivonata rendelkezett bizonyítható hatással. A reményt keltő növények közül eredetileg az *Artemisia annua* L. (*Qing Hao*) (1. ábra) nevű¹, Ázsiában honos, hazánkban is megtalálható (magyar neve *egynyári üröm*) ürömfaj leveleiből főzött tea körülbelül 68 százalékban gátolta a *Plasmodium* parazita fejlődését².

A projekt eredményeit leíró kutatásokat első ízben tízévi kémiai kutatás után 1977-ben ismertették tudományos cikk formájában. A cikk, természetesen kínai nyelven a *Ke Xue Tong Bao* (*Chinese Science Bulletin*) című folyóiratban jelent meg. Az egyoldalas cikk címe: „A szeszkviterpén-lakton egy új változata: *qinghaosu*”. A cikk a következő szöveggel kezdődik: „Az *Artemisia annua* növényből (1. ábra) egy kristályos vegyületet (2. ábra) választottunk el, ami a kínai *qinghaosu* nevet kapta.” A cikk a vegyület tulajdonságainak vizsgálatával folytatódik. Valószínűleg ebben a cikkben említik először a *qinghaosu* elnevezést.

¹ A *Qing Haot* már az okorban ismerték, például aranyér kezelésére és lázcillapításra használták.

² Diószeghy Sámuel 19. század elején kiadott könyvében is megemlíti az egynyári üröm szerepét az akkor Magyarországon is jelentős betegség, a malária kezelésében: „... az üröm igen jó sárgaságban, máj- és lépdagadásban és a napos hideglelésben”. A kiegészítésért köszönet Csupor Dezsőnek.



2. ábra. Az artemizinin szerkezete [4]

3. ábra. A kínai kulturális forradalom alatt és után publikált cikkek a (Qinghaosu) artemizininről [2]



Artemizinin molekulában a maláriaellenes gyógyszerhatáshoz a 2. ábrán is látható peroxicsoport a hatást kiváltó elengedhetetlen tényező.

Az artemizininről és hatásmechanizmusáról azóta jelentékeny mennyiségű szakirodalom jelent meg; egy hasznos összefoglalót itt is megemlítnék [5,6].

Az artemizinin világtermelése és forgalmazása

A malária gyógyítását tekintve véve feltétlenül megemlítenénk, hogy az Egészségügyi Világszervezet (WHO) jóváhagyott egy növényi artemizinin és egy másik maláriaellenes gyógyszer együttes alkalmazására épített *Artemisinin Combination Therapies* (ACT) gyógyszeres koktélt, amit számos maláriaérintett országban alkalmaznak.

2013 körülre a világ *Artemisia*-termesztését körülbelül 100 000 ázsiai és afrikai az *Artemisia annua* (egynyári üröm) mezőgazdasági termesztésére szakosodott kistermelő látta el (4. ábra),

A *qinghaosu*ról beszámoló második cikk 1979-ben jelent meg, szintén kínaiul a Hua Xue Xue Bao (*Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities*) című folyóiratban. Szintén 1979-ben a *Chinese Medical Journal* ezúttal angolul publikálta azt a cikket, amely a *qinghaosu* (artemizint) és malária gyógyítására való alkalmazását a világ tudomására hozta. „A *qinghaosu* kristályszerkezete és abszolút konfigurációja” című cikk angol nyelven jelent meg a *Scientia Sinica* című folyóiratban 1980-ban (3. ábra). Az 523-as projekt keretében azt is tisztázták, hogy az arte-



4. ábra. Kínai Artemisia-ültetvény és kistermelő [6]

és ezt a terméket még a Kínában vadon termő növény begyűjtése is kiegészítette. Jelenleg a világ teljes artemiziningyártásának 80%-a Kínában termesztett *Artemisiából* származik. Vietnam lemaradva követi, körülbelül 10%-os termesztéssel, a maradék Madagaszkárból, Kenyából és Ugandából származik. Csekély mennyiséget Indiában is termesztene, úgyszintén Zimbabweben, Dél-Afrikában és Nigériában. Az átlagos telepített *Artemisia* terméshelyület kistermelőként Kínában és Afrikában körülbelül 0,2 hektár. Egy kilogramm szárított *Artemisia* levélből körülbelül 8 gramm artemizinin állítható elő. Jelenleg a világ artemizinin-igénye körülbelül 150–180 metrikus tonna (MT), a fő vásárlók a WHO által javasolt gyógyszer-kombinációt (ACT) előállító gyógyszergyárak, és ára körülbelül 250–270 USD/kg.

Lévn, hogy az *Artemisia* termesztése a világban koordinátalanul folyt, a termés betakarítása és így a gyógyszergyárak ellátása is rendezetlenül alakult az utóbbi évtizedek során. Ennek megfelelően a gyógyszer ára ingadozott, és időnként az ellátásban is hiányok mutatkoztak. Az ezzel kapcsolatos aggodalmakat 2004-ben egy egyesült államokbeli nagyon alapos tanulmányban is kifejezték [8]. Az aggodalom azért is különlegesen indokolt, mert kérdéses, hogy lehet-e egy olyan, körülbelül egymilliárd embert érintő betegség esetleges gyógyítására épített gyógyszert, mint az artemizinin, nyersanyagának (*Artemisia*) rapszodikus mezőgazdasági termesztésére alapozni akkor, amikor kimutatták, hogy a jelenlegi jelentős és nem teljesen ellátható igények a jövőben csak növekedni fognak.

A fentebb vázolt helyzet ellensúlyozására a malária gyógyítás terén jelentős kutatások folynak új maláriaellenes gyógyszerek közvetlen kémiai szintézis útján való előállítására [9], sőt maláriaellenes oltások kifejlesztésén is dolgoznak [10], de ezek megjelenése még átfogó és hosszabb időt igénylő klinikai igazolásokra vár.

Szintetikus biológiai, illetve biotechnológiai artemizinin-előállítás

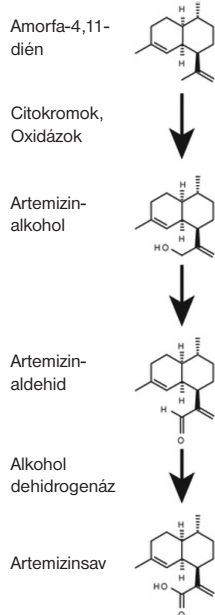
Hasznosnak láttuk ezen a ponton néhány fogalom etimológiai tisztázását. Ennek értelmében definíciószerűen szintetikus biológiának nevezik a biológiai szerkezetek és rendszerek tervezését és építését hasznos célok érdekében. Ez a biológiai kutatás és technológia ama területe, amely a biológiát és a mérnöki munkát kombinálja, gyakran átlapolva a biomérnöki és orvosi biológiai mérnöki területekkel. Magában foglal különböző megközelítéseket, metodológiákat és tudományágakat, amelyek a mérnöki



munkára, a biológiára és a biotechnológiára fókuszálnak [11]. Ehhez még hozzá kell tenni, hogy egyes vélemények az egész területet vitathatónak tartják [12], sőt mások azt tapasztalták, hogy a szintetikus biológia definíciójára rákérdezve tíz megkérdozett kutató tízfélé meghatározást adott, de a legkimerítőbbnek azt tekintették, ami szerint a szintetikus biológia megteremti azokat a szabványokat és protokollokat, amelyekkel az új biológiai funkciók tervezése és kialakítása kiszámíthatóvá, megbízhatóvá, hatékonyvá és olcsóvá válik [13]. Jelen szerző ezek után a területet meglehetősen átfedőnek véli a biotechnológiával, illetve annak létrehozója, a magyar mérnök Ereky Károly által adott klasszikus definíció szerint: „*biotechnológia minden munka, amelynek segítségével anyagokból termékeket állítunk elő élő organizmusok segítségével*” [14].

Amivel a fentiek értelmében foglalkozni szeretnénk, az az artemizinin előállítását irányzó, 2006-ban bekövetkezett egyesült államokbeli áttörés [15].

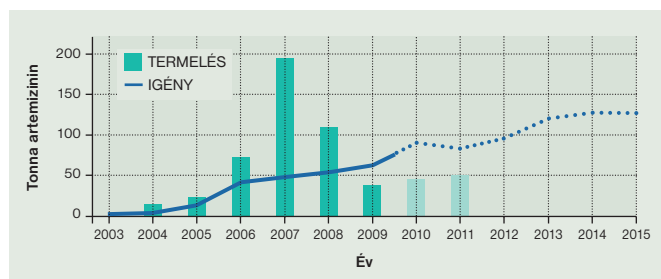
Ugyan a hiányos és nem elegendő artemizinin-világtermelés növelését célzó kémiai szintézis gondolata már régebben is felmerült, sőt meg is valósították, kiderült, hogy kivitelezése bonyolult és drága [16]. Ezzel szemben a fent említett áttörés egy olyan úton indult, amely szerint az artemizinin felszintézise prekursor vegyületéből, a mikrobiális eredetű artemizinsavból anyagilag előnyös, környezetileg kedvező és jó minőségű terméket szolgáltat. E célból a közismert élesztőt (*Sacharomices cerevisiae*) vették igénybe, amiből fermentálással jelentős mennyiségű arte-



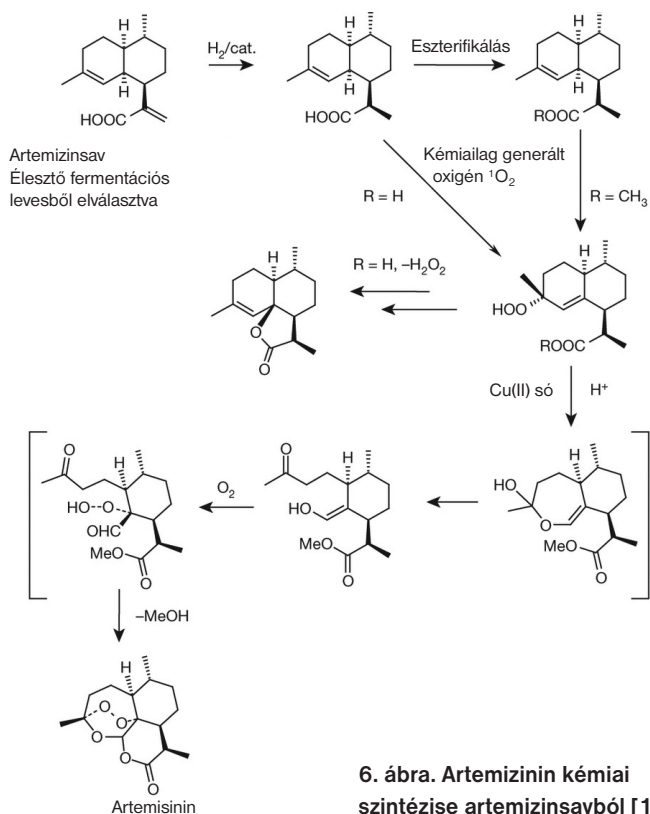
5. ábra. Artemizinsav szintetikus biológiai előállítása [17]

mizinsavat (körülbelül 100 mg/l) sikerült előállítani egy biotechnológiai mevalonát útvonal révén, amorfadién-szintáz és egy az *Artemisia annua* növényből származó citokrom P450 monooxygenáz (CYP71AV1) igénybevételével, ami az amorfa-4,11-dién háromlépéses oxidálásával artemizinsavat eredményez. A bioszintetizált artemizinsav kiválik a feldolgozott élesztő felületén, és aránylag egyszerű tisztítás után kémiai szintézissel előállított artemizininhez vezet.

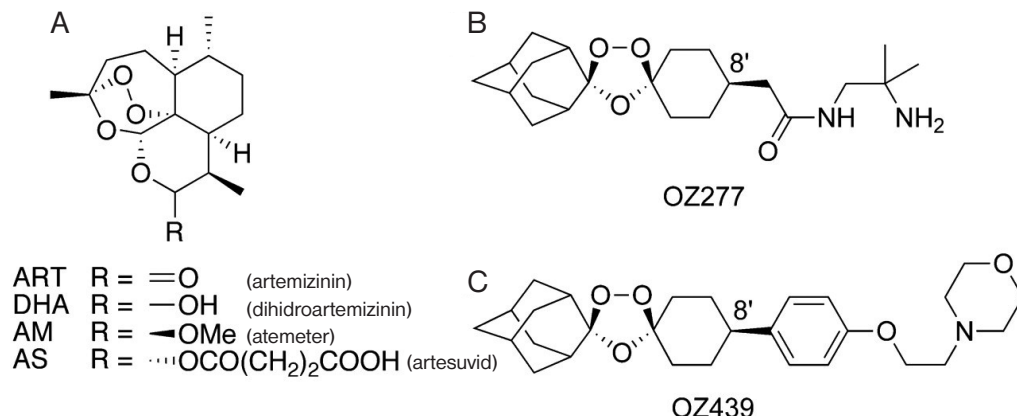
Itt kötelezőnek érezzük, hogy újra visszatérjünk a szintetikus biológia egyik jellemzéséhez, ami szerint az a természetben megfigyelhető mechanizmusokat próbálja reprodukálni, saját céljaira fordítani anélkül, hogy azok működését 100 százalékban megértse [13]. Ezek szemléletében kerülnek bemutatásra az 5. és a 6. ábrán a fentebb vázolt biológiai és kémiai szintézis lépései [15,17]. Mint már említésre került, 2009-re az artemizinin nyersanyaga, az *Artemisia annua* mezőgazdasági termelése már nem tudott lépést tartani a világszerte megnövekedett artemizinin-igényekkel, illetve a gyógyszer ára is emelkedni kezdett. Ez a 7. ábrán is jól követhető [18].



7. ábra. Az artemizinin termelése, igény és ár [18, 19]



6. ábra. Artemizinin kémiai szintézise artemizinsavból [17]



8. ábra. Artemizinin-származékok és ozonidek szerkezete [21].

A: artemizinin,
 B: dihidroartemizinin,
 C: OZ439

akadt anyagi támogató. Ekkor jelentkezett a Bill és Melania Gates Alapítvány egy 42 millió dolláros támogatással. Ezzel indult el több helyen Kiesling vezetésével az artemizinin szintetikus biológiai előállításának kutatása, amit aztán ugyancsak a Kiesling által létesített start-up cég követett.

Végszó

A jövőt tekintve a maláriaellenes gyógyszerek kutatása, illetve a malária gyógyászata világszerte több szinten és irányban folyik [20]. Ezek közül kettőt tartunk itt megjegyzésre érdemesnek. Az egyik irány az olyan vegyületekre vonatkozik, amelyek kémiai szintézise az artemizininénél egyszerűbb és olcsóbb. Ezek közé tartoznak a szintetikus ozonideknek nevezett artemizininszármazékok [21] (8. ábra), különösképpen az OZ439 kódnévvel el látott vegyület.

A másik irány a jelenleg szintetikus biológiára, különösképpen a Kiesling által kezdeményezett, az élesztő fermentálására épített lehetőségek. Bár a biológiai gyógyszer-szintézist eredetileg finanszírozó alapítvány vezetője, *Bill Gates* hangsúlyozta, hogy nem biztos, hogy ez az olcsó artemizinin-termelést végleg megoldja, de az élelmiszeriparban a fermentálásra épített szintetikus biológiára biztos fényes jövő vár.



IRODALOM

- [1] http://www.who.int/malaria/world_malaria_report_2011/9789241564403_eng.pdf World Health Organization. World Malaria Report, 2011
- [2] Braun Tibor, A qinghaosu (artemizinin) felfedezése, Természet Világa (2012) 143, 358.

- [3] http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/2/20/Artemisia_annua.jpg
- [4] <http://en.wikipedia.org/wiki/Artemisinin#mediaviewer/File:Artemisinin.svg>
- [5] Ying Li, Qinghaosu (artemisinin): chemistry and pharmacology, Acta Pharmacologica Sinica (2012) 33, 1141.
- [6] S.Krishna, A.C.Uhlemann, R. K.Haynes, Artemisinins: mechanisms of action and potential for resistance, Drug Resistance Updates (2004) 7, 233.
- [7] <http://www.etcgroup.org/sites/www.etcgroup.org/files/ETC-artemisinin-synbio-case-study2014.pdf>
- [8] „Saving Live, Buying Time: Economics of Malaria Drugs in an Age of Resistance” National Academy of Sciences, 2004.
- [9] J.L. Vennerstrom et al., Identification of an antimalarial synthetic trioxolane drug development candidate, Nature (2004) 430, 900.
- [10] S.Hoffman, Save the children, Nature (2004) 430, 940.
- [11] http://en.wikipedia.org/wiki/Synthetic_biology
- [12] <http://www.theguardian.com/global-development/poverty-matters/2013/apr/12/synthetic-malaria-compound-artemisia-farmers>
- [13] http://www.medicalonline.hu/tudomany/cikk/mire_valo_a_szintetikus_biologia_
- [14] <http://hu.wikipedia.org/wiki/Biotechnol%C3%B3gia>
- [15] D.K. Ro et al., Production of the antimalarial drug precursor artemisinic acid in engineered yeast, Nature (2006), 440, 940.
- [16] G. Schmid, W. Hofheinz, Total synthesis of qinghaosu, J. Am. Chem. Soc. (1983) 105, 624.
- [17] C. J. Paddon et al., High-level semi-synthetic production of the potent antimalarial artemisinin, Nature (2013) 496, 528.
- [18] R. Van Norden, Demand for malaria drugs soars, Nature (2010) 466, 672.
- [19] M. Peplow, Malaria drug made in yeast causes market ferment, Nature (2013) 494, 160.
- [20] A.C.Aguir, E.da Rocha, N.de Souza, T.França, A. Krettl, New approaches in anti-malarial drug discovery and development. A review, Memorias do Instituto Oswaldo Cruz (2014) 109, 631.
- [21] S.A. Charman et al., Synthetic ozonide drug candidate OZ439 offers new hope for a single-dose cure of uncomplicated malaria, Proc. Natl.Acad.Sci. (2011) 108, 4400.
- [22] J. J. Moehrle et al., First-in-man safety and pharmacokinetics of synthetic ozonide OZ439 demonstrates an improved exposure profile relative to other peroxide anti-malarials, Br.J.Clin.Pharmacol. (2013) 75, 524.
- [23] <http://arstechnica.com/science/2012/04/after-artemisinin-prospects-for-new-malaria-drugs/>
- [24] C. Barras, Anything plants can grow, New Scientist (2014) April, 34.

Kilencedszer nyert az EGIS innovációs díjat

Az Egis Gyógyszergyár Zrt. bisoprolol-amlodipin hatóanyagú fix kombinációs készítménye nyerte el a 2014. évi Ipari Innovációs Díjat. Az Egis a világon elsőként fejlesztett, gyártott és hozott forgalomba bisoprolol és amlodipin hatóanyagokat egyetlen tablettában tartalmazó vérnyomáscsökkentő készítményt.

Környezetvédelmi innovációs díjat nyert a Mol-gumibitumenből épített út

A Mol-gumibitumen alkalmazásának előnyei, hogy a normál bitumenes úthoz képest másfélszer hosszabb élettartam érhető el,

ásványi anyaghoz való kiváló tapadása csökkenti a kátyúk kialakulásának esélyét, a forgalmi terheléssel szembeni jobb ellenálló képesség alacsonyabb fenntartási költséget eredményez. Emellett kisebb a menetzaj, valamint nagyobb a közlekedésbiztonság a rövidebb fékút miatt. A termék alkalmazásával a használt gumiabroncsok környezetbarát újrahasznosítása valósul meg értéktelremtő módon. Új nyomvonalú út építésénél a Strabag alkalmazta először a Mol új termékét: a Villányt elkerülő 4,2 km hosszúságú út teljes aszfalt pályaszerkezetének építése gumibitumenes aszfalttal történt. A munkához 22 ezer tonna aszfaltot használt fel a Strabag, az ehhez szükséges gumibitumen-gyártáshoz a Mol 22 ezer darab elhasznált személygépkocsi-gumibroncsból előállítható gumiőrleményt hasznosított.

B. E.



Vegyészkalendárium

Pap József-Sándor rovata

EDUARD BUCHNER (1860. MÁJUS 20.) – EGY TÖKÉLETESEN HÉT-KÖZNAPI KÉMIKUS. A Buchner név gyakori Bajorországban, de semmi esetre sem keverendő össze a Büchner változattal. Utób-



biként ismerhetjük a vákuumszűrészhez használatos tölcserő, mely az ipari kémikus Ernst Büchner nevét viseli. Eduard atya egy másik, umlaut nélküli Ernst Buchner, müncheni törvényszéki orvosprofesszor, akinek három házasságából származó utódai mind kiváló oktatásban és szülői támogatásban részesülnek. A családban generációkra visszamenőleg találhatunk természettudósokat, például a szalicilsavat izoláló Johann Andreas Buchnert, Ernst

atyai nagybátyját, vagy fiát, Ludwig Andreast, az egyik legelső klinikai kémikust. Eduard tíz évvel idősebb bátyja, Hans kiváló bakteriológusként válik ismertté és fontos szerepe lesz öccse legjelentősebb felfedezésében.

Eduardot kereskedelmi pályára szánják, de apja 1872-es halála más utat jelöl ki számára. A középiskolát még bátyja támogatásával végzi, de a műszaki egyetem mellett már dolgoznia kell, hogy eltartsa magát. Négy éven keresztül egy konzervgyárban adagolja a cukrot gyümölcsök mellé, s ezalatt még katonai szolgálatot is teljesít. Az egyetemen Erlenmeyer vezet be a kémia tudományába. Innen ered két meghatározó barátsága is: Theodor Curtiusszal (a diazo-ecetsav és a hidrazin felfedezője) és Hans von Pechmann-nal (az ő nevéhez a diazo-metán köthető).

A Münchener Műszaki Egyetemen töltött idő véglegesen a tudományhoz láncolja. 1884-től Adolf von Baeyerhez szegődik, aki- ben egészen 1893-ig nagylelkű patrónusra talál. Baeyer még azt is elnézi neki, hogy munkája közben kikacsint a növényélettan felé, Carl Wilhelm Nägeli jóvoltából. Első cikke is innen kerül ki, melynek címe „Der Einfluss des Sauerstoffs auf Gärungen” (Az oxigén hatása a fermentációra – 1885). Ezt a kutatást egyedül végzi, bár bátyja, Nägeli és szerves kémikus társai segítsége tagadhatatlan. Legfontosabb eredménye, hogy megkérdőjelezi a Pasteur-hatásként ismert jelenséget. Vagyis megállapítja, hogy az oxigén alacsony koncentrációja nem kizárólagos feltétele a fermentációnak, mellette vannak más, még ismeretlen hatások is, amelyek beleszólnak a folyamatba, például a foszfát-egyensúly. Von Baeyer mindvégig kissé gúnyosan tekint Buchner fermentációs munkájára, aki ezekben az években Erlangenben, Otto Fischer laboratóriumában is megfordul. Végül 1888-ban doktorál pirrolhoz kapcsolódó munkájából von Baeyernél, aki ugyan nem tartja kiemelkedő tehetségű kémikusnak, de mint embert nagyra becsüli, s 1891-ben lehetővé teszi számára a habilitációt. Mi több, a müncheni sörfőzőktől nagyvonalú támogatást szerez Buchner számára, aki így egy kis laboratóriumot építhet, hogy az élesztőgombákat fogja vallatóra. 1893-ban, első kísérletei során megpróbálja az erjedésért felelős anyagokat kinyerni a sejtekből, azok szétzúzásával. Az egyszerű életformák és metabolizmusuk kísérletes kuta-

tása, mint a bonyolult élettani folyamatok megértésének egyik lehetséges kulcsa, ekkor már régóta foglalkoztatja a tudományos társadalmat. Mégis, a tanácsadó testület úgy dönt, hogy az ilyesfajta kísérletezés semmire sem vezet, és épp ezért be kell szüntetni.

Talán ennek köszönhető, hogy von Baeyer tanítványa 1893 őszén a Kieli Egyetemre távozik Curtius mellé. Bekapcsolódik barátja diazo-etil-acetátos kísérleteibe, s 1895-ben professzori kinevezést kap. Egy év sem telik el, és másik barátja, Pechmann jóvoltából Tübingenben köt ki. Újra közel kerül bátyjához, akivel 1896 nyarán a Münchener Higiéniai Intézetben visszatérnek az élő sejt nélküli erjedés problémájához. Végre a hely és az anyagi háttér is adott a szisztematikus vizsgálatokhoz, így már 1897 januárjában beküldheti első közleményét a *Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft*-hoz, „Alkoholische Gärung ohne Hefezellen” (Alkoholérjedés élesztősejtek nélkül) címmel. Mai szemmel nézve is meglepő, hogy a cikk két héten belül nyomtatásba kerül! Ebben leírja, hogyan lehet kvarcporral és diatómafölddel kevert nedves élesztőkultúrából 300 atmoszférás nyomás alatt sárga, proteinben gazdag levet préselni, amely a cukrot etanolá és szén-dioxiddá képes alakítani, viszont élő sejtet nem tartalmaz. Innen indul útjára a zimológia, vagyis az erjedéstan tudománya és az *in vitro* biokémia.

1898-ban a berlini Általános Kémiai és Mezőgazdasági Főiskola elnöki tisztére kéri föl, innentől kezdve jobbnál jobb ajánlatokkal környékezik meg a nagynevű iskolák. Az 1907-es esztendő jelenti karrierje csúcát, hiszen ebben az évben kémiai Nobel-díjjal tüntetik ki biokémiai eredményeiért és a nem sejtes fermentáció felfedezéséért. Itt érdemes megjegyezni, hogy egy ilyen presztízsű díjhoz mérten szokatlanul rövid időnek, az első cikktől számítva mindössze tíz évnek kell eltelnie az odaítélésig, de rögtön illik azt is hozzáfűzni, hogy messze nem érdemtelenül. Az elmúlt bő egy évszázad messze igazolja Buchner úttörő munkájának jelentőségét.

Az I. világháború kitörése előtt még Wrocław (1909) és Würzburg (1911) jelenti munkássága jeles állomásait, mindkét helyen folytatja fermentációs kutatásait. A boldog békeidők elmúlnak, 1914-ben az akkor 53 éves tartalékos szolgálatra jelentkezik. Patriotizmusával persze nincs egyedül, számos más professzor is hasonlóan dönt akkoriban. De míg legtöbbjük inkább a biztonságot jelentő hátszországban tevékenykedik, Buchner egy romániai frontkórház vezetőjeként áll csatásorba. 1917-ben megsebesül, és sebe elfertőződik. Néhány napra rá szepsziszben hal meg, 57 évesen.

(Forrás: L. Jaenicke, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 6776–6782.)

Buchner vérbeli hegyászó hírében állt, aki azonban semmi pénzért nem hagyta volna ki az éjjeli mulatságokat sem. Így gyakran megesett, hogy a hegyek ormai helyett éjjel a város-háza erkélyéről szórakoztatta a (kevésbé lelkes) hallgatóságot jódlíművészetével. Két lelkes ivócimborája éppen Curtius és Pechmann volt. Pletykák szerint 1900-ban tartott lakodalmá estéjét is kis híján kijózanító zárkában töltötte.

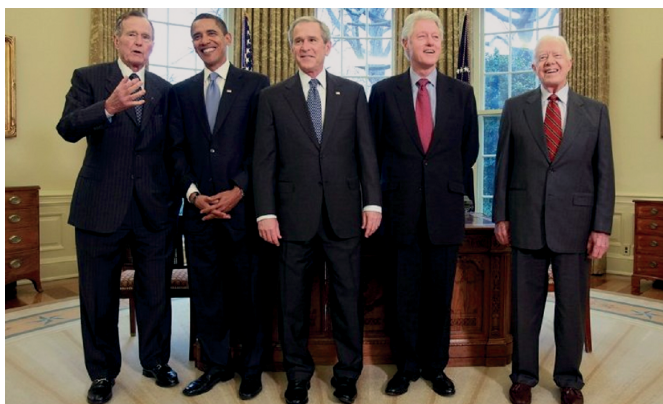


TÚL A KÉMIAÁN

Politikai boldogságtan

Korábbi társadalomtudományi kutatások elég egyöntetűen azt mutatták, hogy az Amerikai Egyesült Államokban a magukat konzervatívoknak valló emberek általában boldogabbak, mint a liberálisok. Ezt a megfigyelést helyezi új fénybe egy nemrég publikált felmérés eredménye. A korábbi tesztek kizárólag személyes kérdéseken alapultak, s néhány kutatónak már akkor is gyanús volt, hogy a különbség forrása inkább a válaszadási stílus, semmint a valós érzelmi háttér. Ezért az új tanulmányban a kérdésre adott válaszokon kívül más, objektívebbnek gondolt jellemzőket is figyelembe vettek: Twitter és LinkedIn bejegyzések megfogalmazását, fényképeken a mosoly intenzitását és őszinteségét. A közvetlen válaszokban itt is a konzervatívok vallották magukat boldogabbnak, a többi külső jel azonban a liberálisok esetében volt pozitívabb. Persze, ez a megfigyelés még nem jelenti azt, hogy bármelyik tábor híján lenne az őszinteségnek: a jelenség magyarázata lehet a szóbeli kérdésekre adott válaszokhoz való előtérő hozzáállás is.

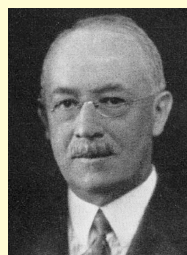
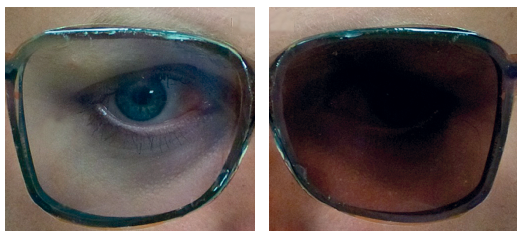
Science 347, 1243. (2015)



Színváltó szemüveg

Az erős napfényben „önmaguktól” sötétebbé váló napszemüvegek már ma sem ismeretlenek, de működésük gyakran elég lassú és nem is különösebben megbízható. A közelmúltban olyan újításról számoltak be, amely jelentős előrelépést jelent ezen a területen. Elektrokrómos polimerek (ECP-k) segítségével ciánkék és sárga színben is sikerült a transzmittanciáját néhány másodperc alatt 10 és 70% között megváltoztatni képes anyagokat előállítani. Ezek megfelelő arányú keverésével barna árnyalatok állíthatók elő, s az eddigi vizsgálatok szerint a készített polimer szemüvegekben sokkal jobban működhet, mint a hagyományos bevonatok.

ACS Appl. Mater. Interfaces 7, 1413. (2015)



CENTENÁRIUM

Gregory Paul Baxter, Fred Leslie Grover: A Revision of the Atomic Weight of Lead. The Analysis of Lead Bromide and Chloride
Journal of the American Chemical Society, Volume 37, pp. 1027–1061 (1915. május)

Gregory Paul Baxter (1876–1953) amerikai kémikus volt. 1897-től nyugdíjba vonulásáig a Harvard Egyetemen dolgozott, a Theodore William Richardsról elnevezett professzori állást töltötte be. 1930-tól 1949-ig az International Committee on Atomic Weights elnöke volt.



APRÓSÁG

A Toyota szabadon felhasználhatóvá teszi a tüzelőanyag-elemekkel kapcsolatos mintegy 5700 szabadalmát.

Felvilágosult ammóniaszintézis

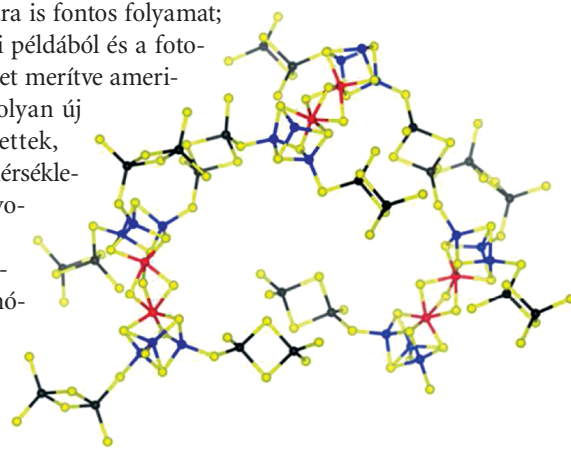
A Haber-Bosch-eljárással évente nagyjából 200 millió tonna ammóniát készít a vegyipar viszonylag nagy nyomást és hőmérsékletet alkalmazva. A nitrogénmegkötés az élőlények számára is fontos folyamat;

ebből a biológiai példából és a fotoszintézisből ihletet merítve amerikai kémikusok olyan új anyagot készítettek, amely szobahőmérsékleten és légköri nyomáson, megvilágítás hatására katalizálja az ammóniaszintézist.

A katalizátort „kalkogél”-nek nevezték el, kémiai összetétele

alapján Sn_2S_6 -egységekkel összekapcsolt $\text{Mo}_2\text{Fe}_8\text{S}_8$ -klaszterekből álló, amorf szilárd anyag. A folyamat hatékonysága egyelőre ipari célokra nem felel meg, de további kutatással még lehet javítani rajta.

J. Am. Chem. Soc. 137, 2030. (2015)



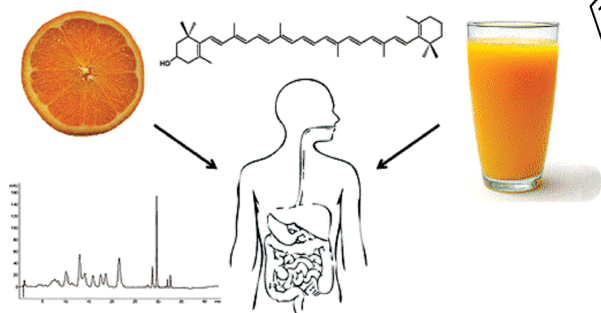
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg.mkl@science.unideb.hu.



A HÓNAP MOLEKULÁJA

A Phainanoid F ($C_{44}H_{52}O_{12}$) vegyületet a trópusi területeken termő, latin nevében a kínai Hainan szigetét hordozó *Phyllanthus hainanensis* növényből izolálták öt hasonló szerkezetű és élettani hatású anyaggal együtt. A benne lévő gyűrűrendszer korábban ismeretlen volt a kémiában. Az immunrendszer működését gátolja, ezért gyógyszerként fontos szerepe lehet szervátültetések után a kilökődés megállításában.

J. Am. Chem. Soc. 137, 138. (2015)



Narancs vagy narancslé?

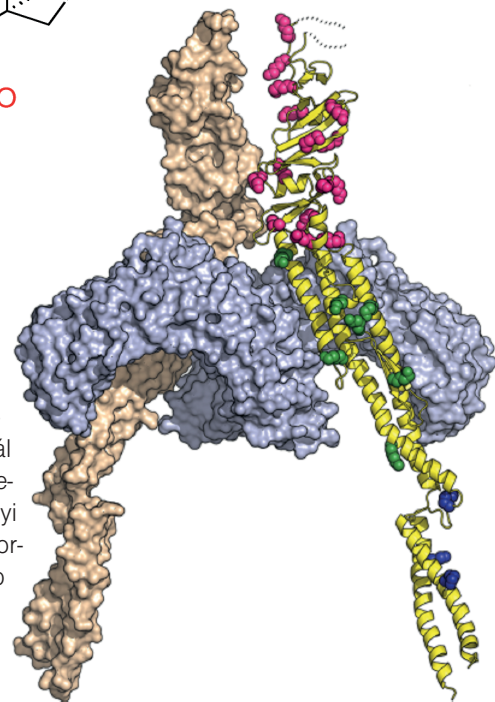
Ha valakinek eddig dilemmát okozott volna, hogy a friss narancs, a frissen facsart narancslé vagy esetleg a dobozos narancslé egészségesebb-e, annak nagy megkönnyebbülést fog okozni német és szaúd-arábiai kutatók munkája, amelyben megfelelő analitikai eljárások kifejlesztése után a narancsban lévő karotinoidok, flavonoidok és C-vitamin koncentrációját követték feldolgozás közben. A tapasztalatok szerint az aszkorbinsav és a β -karotin gyakorlatilag változatlanul belekerült a termékekbe, de a flavonoidok koncentrációja majdnem egy nagyságrendet csökkent narancslékészítés közben. A tanulmányban vizsgálták az élő szervezetek számára való hozzáférhetőséget is: ebben a kész narancslé pasztörizálása csekély növekedést okozott.

J. Agric. Food Chem. 63, 578. (2015)

Kokain-vakcina

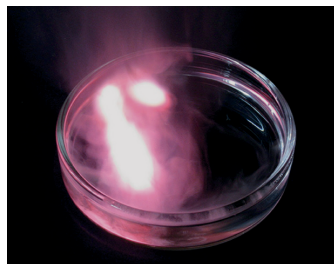
A kokainfüggőség az Amerikai Egyesült Államokban egymilliónál is több embert közvetlenül érintő egészségügyi probléma. Jelenlegi orvosi kezelése leginkább tüneti. Egy közelmúltban publikált munka nagy lépést tett a kokainhatás elleni védőoltás kifejlesztése felé. Egy önmagában is erős immunválaszt kiváltó bakteriális fehérje, a flagellin módosításával olyan új anyagot sikerült létrehozni, amelynek hatására egérsérletekben kokainspecifikus antitestek keletkeztek. Ezekhez kötődve a kokain már nem képes átjutni a vér-agy gáton, s így nem fejti ki hatását.

Mol. Pharmaceutics 12, 653. (2015)



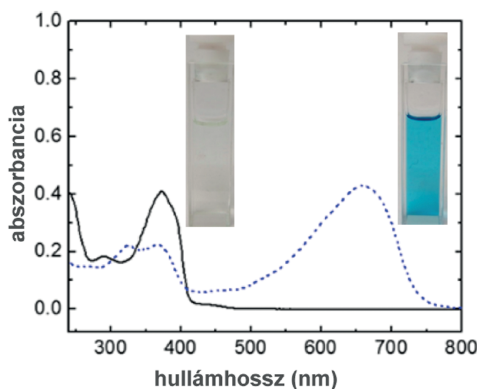
Újratöltött alkálifém-robbanás

Az alkálifémek nagyon heves reakciója vízzel a középiskolai kémiaórák egyik klasszikus kísérlete. Cseh tudósok azt mutatták ki a közelmúltban, hogy a folyamat során a kisebb robbanásokat a korábbi feltételezésekkel ellentétben valójában nem a keletkező hidrogéngáz begyulladás okozza, hanem a fémbe kialakuló nagy elektrosztatikus kiegyensúlyozatlanság. Ezt a következtetést azután vonták le, miután nátrium



és kálium ötvözetének vízzel való reakcióját nagy sebességgű (10 000 kép/másodperc) kamerákkal rögzítették, és a felvételeket elemezték. Az eredmények szerint a fém felhagyó elektronok viszonylag kis felületen koncentrálnak pozitív töltést hagynak vissza, s a bekövetkező robbanás elektrosztatikai okokra vezethető vissza – a fizikában ezt Coulomb-robbanásnak hívják.

Nature Chem. 7, 250. (2015)



Vegyifegyverre érzékeny polimer

Vegyifegyverek jelenlétének gyors kimutatására alkalmas polimer állítottak elő a közelmúltban. Az anyagot alternálva ditienobenzotropon-szerű és 9,9-dioktil-2,7-dibromfluorén monomeregységek alkotják. A kész polimer mind oldatban, mind vékony film formájában – az idegázokhoz nagyon hasonló kémiai szerkezetű dietil-klórfoszfát hatására – élénk színűvé válik, így vegyifegyverek helyszíni azonosítására alkalmas lehet.

ACS Macro Lett. 4, 138. (2015)

Tisztújító taggyűlések



Február 26-án tartotta előadójátékát a *Ritz Ferenc* tagtársunk által újraindított Nyugdíjas Kémikusok Köre. Előadásában *Tömpe Péter* egy véletlenül megtalált középkori könyvet mutatott be, ami az 1583-ban Bázelen nyomtatott, alkímiával és középkori orvoslással foglalkozó, kézzel festett ábrákat tartalmazó munka. A *Leonhard Thurneysers zum Turn* alkímista és paracelzianus orvos által írt latin és német nyelvű könyv a Károlyi Érseki Könyvtár igen értékes darabja. A *Természet Világa*

2014. októberi számát olvasva többet is megtudhatunk a tudományos részletekről.

Tekintettel arra, hogy ez év tavaszán esedékes a Magyar Kémikusok Egyesülete tisztújító küldöttközgyűlése, az azt megelőző tisztújító taggyűlést is ezen a napon tartotta meg a Kémia- és Vegyipar-történeti Szakosztály, valamint az Analitikai Szakosztály Szerves- és Gyógyszer-analitikai Szakcsoportja.

Az előadást meghallgató egyesületi tagok választási eredményei szerint

a Kémia- és Vegyipar-történeti Szakosztály

elnökének: dr. Vámos Évát,

megbízott titkárának: dr. Tömpe Pétert,

a Szerves- és Gyógyszer-analitikai Szakcsoport

elnökének: dr. Tömpe Pétert,

titkárának: dr. Meszlényi Gábort

választották meg.

Az MKE küldöttközgyűlésen a titkárok képviselik a szakosztályt, illetve szakcsoportot.

T. P.

Az MTA Műszaki Kémiai Tudományos Bizottság újjáalakuló ülése

Az MTA Műszaki Kémiai Tudományos Bizottsága újjáalakuló ülést 2014 novemberében tartotta.

Az ülést Horvai György osztályelnök-helyettes vezette le. Köszöntötte a megjelenteket és ismertette a napirendi pontokat. Először felkérte Szépvölgyi Jánost, a bizottság leköszönő elnökét, tartsa meg beszámolóját. Az elhangzott előadáson a bizottság elmúlt hároméves munkáját mutatta be Szépvölgyi János elnök úr. Ismertette az egyes munkabizottságok összetételét és munkáját. Értékes információkkal szolgált a bizottság koreloszlásáról és a tudományos fokozatok számáról.

A következő napirendi pont a bizottság képviselőinek megválasztása volt. Horvai György ismertette a jelöltek nevét, melyek a szavazólapra kerültek: elnök: Mizsey Péter, Bélafiné Bakó Katalin, titkár: Rippelné Pethő Dóra, a Kémiai Doktori Tudományos

Bizottság tagja: Szépvölgyi János, a Kémiai Doktori Bizottság póttagja: Gyenis János, Bartha László.

A választáson 18 szavazatképes tag volt jelen a 22-ből. A választás titkosan, írásban zajlott. Horvai György szavazatszámlláló bizottságot jelölt ki Chován Tibor és Kőszné Székely Edit személyében. A szavazatok összeszámolását követően megállapították, hogy a választás az első forduló után érvényes volt. Horvai György osztályelnök-helyettes ismertette a szavazás eredményét:

elnök: Bélafiné Bakó Katalin,

titkár: Rippelné Pethő Dóra,

a Doktori Tudományos Bizottság tagja: Szépvölgyi János,

a Doktori Tudományos Bizottság póttagja: Gyenis János.

A szavazást követően Németh Jenő bejelentette visszavonulási szándékát a Vegyipari Gépészeti Munkabizottság elnöki teendőitől. A megüresedő elnöki posztra más jelölt nem volt, így az új összetételű bizottság egyhangúlag megszavazta a Vegyipari Műveleti Munkabizottság és a Vegyipari Gépészeti Munkabizottság összevonását. Az új bizottság Vegyipari Műveleti és Gépészeti Munkabizottság néven alakul újjá. A Műszaki Kémiai Tudományos Bizottság a következő hároméves ciklusban öt állandó bizottsággal működik tovább: Anyagtudományi és Szilikátkémiai Munkabizottság, Biomérnöki Munkabizottság (közös), Folyamatmérnöki Munkabizottság, Kémiai és Környezettechnológiai Munkabizottság, Vegyipari Műveleti és Gépészeti Munkabizottság.

Az ülés végén Szépvölgyi János átadta a szót Bélafiné Bakó Katalinnak, aki megköszönte a bizalmat és felhívta a figyelmet, hogy a munkabizottságok újjáalakulását mielőbb bonyolítsák le, majd bezárta az ülést.

Rippelné Pethő Dóra

VISSZAEMLEKEZÉS

Amikor a lustaság szerendipitást szült

1983-ban tio-cAMP-ot¹ akartam készíteni, és helyette cAMP-amiidot² szintetizáltam. Akkor még nem tudtam, hogy az ilyen szerencsés véletlent szerendipitásnak nevezik. Nemcsak a szerendipitás (serendipity)³ szót nem ismertem, de Pasteur mondását sem, miszerint a megfigyelés során a szerencse csak a felkészült, éles elmét támogatja.

1982 szeptemberétől egy éven át Salt Lake Cityben, a utahi egyetem kémiai tanszéken Wesley Benitude professzor munkatársa voltam. Tervezett munkámat, egy Szegeden elképzelt eljárást a nukleozid-3',5'-ciklofoszfátok dimetilamidjainak szintézisére, időben befejeztem, maradt még néhány hetem. Benitude arra kért, nézzem meg, alkalmazható volna-e a szintézismódszer a tio-cAMP előállítására. Az volt az elképzelés, hogy a cAMP⁴ vízmentes körülmények között végrehajtott aktiválása után a reakcióelegyet dimetil-amin helyett valamilyen szulfidval bontom meg. A kilenc kristályvizet tartalmazó nátrium-szulfid kristályvizétől nem tudtam hogyan szabadulhatnék meg, utánanézni meg lusta voltam. Ezért a bizonytalanabb összetételű, de víz-

¹ Adenozin-3',5'-tiociklofoszfát

² Adenozin-3',5'-ciklofoszfamidát

³ A szót Horace Walpole fabrikálta a Serendip három hercege című régi perzsa mese alapján. A kis hercegek kalandozásaik során váratlan felfedezéseket tesznek. Kalandozásaik helyszíne Serendip (Sarandib), ami Sri Lanka arab neve.

⁴ Adenozin-3',5'-ciklofoszfát

mentes ammónium-szulfid használata mellett döntöttem. Meglepetésemre, szemben az előállítani kívánt negatív töltésű tio-cAMP-pel, a termék egy semleges anyag volt, melyről hidrolízis-termékeinek rétegekromatográfiás analízise alapján csaknem biztosra vettem, hogy a korábban még senki által nem szintetizált cAMP-amidot tartom a kezemben. Itt volt tehát az anyag, melyet addig, hiába próbálkoztunk vele nem is egyszer, nem tudtunk szintetizálni. Most megjelent, de csak egészen rövid bemutatkozó látogatásra jött. Kalapot emelt, azután továbbúnt. Mert Salt Lake Cityben soha többet nem tudtam elkészíteni, és csak jóval később, Szegeden jöttem rá, miért nem. Amikor a körünkből oly sajnálatosan korán eltávozott kiváló munkatársam, Bottka Sándor szívós kitartása a vegyület reprodukálható szintézisét eredményezte. Így nemcsak az egzakt szerkezetet, hanem az anyag hidrolízissel szemben mutatott nem várt érzékenysége is megismerhettük.

Tomasz Jenő

KITÜNTETÉSEK

Kutatók kitüntetése a nemzeti ünnepen

Harmincöt tudós vehetett át a március 15-i nemzeti ünnep alkalmából állami elismerést. A Magyar Érdemrend középkeresztjét a csillaggal öt, a Magyar Érdemrend középkeresztjét tíz, a Magyar Érdemrend tisztí keresztjét tizenkét, a Magyar Érdemrend lovagkeresztjét pedig nyolc kutató kapta meg.



Kiss Tamás professzort – az MKE Intézőbizottságának alelnökét, az MKL felelős szerkesztőjét – a Magyar Érdemrend lovagkeresztjével tüntették ki. A fotón Simonné Dr. Sarkadi Livia köszönti, és mindannyian szeretettel gratulálunk! (MKE)

A Magyar Érdemrend középkeresztjét kapta: *Blaskó Gábor* Széchenyi-díjas kémikus, az MTA rendes tagja, a Budapesti Műszaki Egyetem címzetes egyetemi tanára, a Servier Kutatóintézet Zrt. ügyvezető igazgatója a magyar kémiai alap- és gyógyszerkutatás hírnevének fenntartásához való hozzájárulása, nemzetközi szinten is elismert kutatási eredményei, valamint jelentős tudományos közéleti tevékenysége elismeréseként; *Pukánszky Béla* vegyészmérnök, az MTA rendes tagja, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszékének vezetője, a Műanyag- és Gumiipari Laboratórium csoportvezetője több évtizedes kiváló oktatói, oktatásszervezői és tudományos iskolateremtő tevékenysége, valamint a heterogén polimer rend-

szerek kutatása területén elért nemzetközi szintű tudományos eredményei elismeréseként; *Vígh László* Széchenyi-díjas kutató-vegyész, biokémikus, az MTA rendes tagja, az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpontjának kutatóprofesszora, a Szegedi Tudományegyetem címzetes egyetemi tanára, a Straub Örökség Alapítvány elnöke a stressz és adaptáció sejt- és molekuláris szintű folyamatainak megismerését célzó kutatási eredményei, valamint a kutatói pálya népszerűsítése érdekében végzett jelentős tudományszervezői tevékenysége elismeréseként.



A Magyar Érdemrend tisztí keresztje kitüntetésben részesült *Kékesi Tamás* kémikus, az MTA doktora, a Miskolci Egyetem rektorhelyettese, a Műszaki Anyagtudományi Kar Metallurgiai és Öntészeti Intézet igazgatója, tanszékvezető egyetemi tanár a kémiai metallurgiai tudományterületen évtizedek óta kivételesen magas színvonalon végzett oktatási-kutatási, valamint példamutató vezetői tevékenysége elismeréseként.

A Magyar Érdemrend lovagkeresztjét nyerte el: *Dücső Csaba* vegyész, az MTA Energiatudományi Kutatóközpont Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézetének tudományos főmunkatársa a hazai mikrotechnológiai kultúra fenntartásában és fejlesztésében szerzett érdemei, valamint a kutatási eredmények terjesztése és gazdasági hasznosítása érdekében végzett tevékenysége elismeréseként; *Kiss Tamás József*, a kémiai tudomány doktora, a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének tanára kimagasló tudományos eredményei, valamint jelentős oktatói és tudományszervezői tevékenysége elismeréseként; *Schiller Róbert*, a kémiai tudományok doktora, az MTA Energiatudományi Kutatóközpont kutató professor emeritusa, az Eötvös Loránd Tudományegyetem címzetes egyetemi tanára, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem magántanára a tudomány és a művészetek közötti szakadék áthidalása érdekében végzett több évtizedes, kiemelkedő szakmai tevékenysége elismeréseként.

A Mol kitüntetettjei

Prometheus-díjat kapott *Volter György*, aki 1999-ben kezdett a Molnál; 2013 óta a Mol Magyarország Kutatás-Termelés szervezetében az üzleti támogatásért felelős terület vezetőjeként kiemelkedő szerepet tölt be az ország energiaellátásában jelentős kőolaj- és földgáztermelés, illetve kutatás megvalósításában.

A Magyar Érdemrend tisztí keresztjével tüntették ki *Bérczi István* geológust, a Mol nyugalmazott vezérigazgatói tanácsadóját, a Miskolci Egyetem Ásvány- és Kőzettani Tanszékének professor emeritusát. A kitüntetést a földtudomány területén elért ki-



emelkedő kutatási eredményei, magas szintű oktatói munkája, valamint szerteágazó szakmai közéleti tevékenysége elismeréseként kapta.

Minden kitüntetettnek gratulálunk és munkájához további sikereket kívánunk!

OKTATÁS

Oláh György Országos Középiskolai Kémiaverseny

Március 13-án és 14-én országos rendezvény fináléjának adott otthont a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem CH épülete. Egészen új kémiaverseny döntőjén mérhették össze tudásukat a levelező fordulók legjobban teljesítő diákok.

A BME Vegy-Érték Tehetségpont és a BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium a Magyar Kémikusok Egyesületének támogatásával az idei tanévben először országos kémiaversenyt hirdetett meg. A verseny alapvető célja az érdeklődés felkeltése, illetve fenntartása a természettudományos tárgyak, elsősorban a kémia iránt a középiskolások körében. Emellett azonban szeretnénk volna újat is mutatni a már hagyományosnak számító tanulmányi versenyek igen színes palettáján. Ehhez mérten fiatalos hangvétellel és érdekes, gyakorlatias feladatokkal próbáltuk megnyerni a diákokat. A legfőbb kommunikációs csatornának az Internetet választottuk. Nemcsak a regisztráció és az információcsera, hanem a megoldások beküldése is főleg elektronikus úton zajlott.

A nevezők három kategóriában indulhattak, melyek lefedték a teljes középiskolás korosztályt. Versenyünk három levelező for-

dulóval indult. A kezdeti, összesen csaknem háromszáz induló közül minden fordulóban egyre kevesebben jutottak tovább. Végül a Műegyetemen megrendezett kétnapos döntőbe mindösszesen a harmincnégy legkiválóbban teljesítő ifjú kémikus nyерhett meghívást.

A rendezvényen egy írásbeli, valamint egy szóbeli fordulón mérhették össze tudásukat a versenyzők. Az előbbin főleg példamegoldó készségre, illetve kreatív gondolkodásra, valamint egy csipetnyi mérnöki szemléletre is szükség volt a jó eredményhez. A szóbeli fordulóra előre kiosztott témából készültek fel a diákok, illetve prezentáció formájában adták elő témájukat a szakmai zsűri előtt. A döntőn közös játékokkal, illetve múzeumlátogatással oldottuk a feszültséget és építettük a szülő-tanár-diák kapcsolatokat. Az eredményhirdetés ünnepélyességét az Egis Zrt. biztosította, vendégül látva a döntő résztvevőit a 100 éves évforduló alkalmából készült új Tudományos és Technológiai Központjában.

Nem volt kis feladat egy ekkora kaliberű rendezvény megszervezése, de rengeteg anyagi és tárgyi felajánlást, valamint egyéb hasznos segítséget kaptunk munkánk során, melyek nélkül nem jöhetett volna létre a verseny. Köszönetet mondunk a következő intézményeknek: Richter Gedeon Nyrt., Egis Zrt., Merck Kft., BASF Magyarország, Linde Kft., BorsodChem Zrt., Bálint Analitika, Nitrogénművek Zrt., Hungaropharma Zrt., Linde Gáz Magyarország Zrt., Fornetti Kft., Nemzedékek Tudása Tankönyvkiadó, a Harmat Kiadó, az Universitas Könyvesbolt. Köszönjük Dobéné Cserjés Editnek az összes írásbeli forduló lektorálását, valamint a BME Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Kar Dékáni Hivatalának a mindenre kiterjedő támogatást.

A pozitív visszajelzéseken felbátorodva terveink szerint a következő tanévben is meghirdetjük a versenyt, melyre egyaránt várjuk a kémia iránt elkötelezett, valamint a még kevésbé érdek-

A döntő eredménye

Első kategória

Helyezés	Név	Iskola	Város	Felkészítő tanár
1	Solymosi Gergely Tamás	Ceglédi Kossuth Lajos Gimnázium	Cegléd	Tűriné Juhász Ilona
2	Kalapos Péter	ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola	Budapest	Kutrovács László
3	Bardi Csaba	Tóth Árpád Gimnázium	Debrecen	dr. Várallyainé Balázs Judit
4	Misius Tamás Bálint	ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola	Budapest	Kutrovács László
5	Nagy Erzsébet Kincső	Szeberényi Gusztáv Adolf Evangélikus Gimnázium, Művészeti Szakközépiskola, Általános Iskola, Óvoda, Művészeti Iskola és Kollégium	Békéscsaba	Vozár Andrea
6	Farkas Ágnes	Török Ignác Gimnázium	Gödöllő	Kalocsai Ottó, Karasz Gyöngyi
7	Schmelcz András	PTE Babits Mihály Gyakorló Gimnázium és Szki.	Pécs	Bodó Jánosné Szabó Katalin
8	Balázs Brúnó Bánk	Mátyás Király Gimnázium	Fonyód	Feketéné Györe Szilvia
9	Molnár Krisztina	Tóparti Gimnázium és Művészeti Szakközépiskola	Székesfehérvár	Paál Margit
10	Borsodi Levente	Mátyás Király Gimnázium	Fonyód	Feketéné Györe Szilvia
11	Pál Gergő	PTE Babits Mihály Gyak. Gimn. és Szak. Isk.	Pécs	Bodó Jánosné Szabó Katalin
12	Koncz Lili	ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola	Budapest	Kutrovács László

ÁLLÁSHIRDETÉS:

Az Európa 2000 Középiskola a 2015/16. tanévre főállású kémiatanárt keres.

Jelentkezés: Takácsné Laczó Sylvia

Telefon: +36 (1) 2514177, **email:** laczo.sylvia@europa2000.hu





Második kategória

Helyezés	Név	Iskola	Város	Felkészítő tanár
1	Kovács Dávid Péter	Szent István Gimnázium	Budapest	dr. Borbás Réka
2	Varga Gábor	Dobó Katalin Gimnázium	Esztergom	Mikolai Lászlóné
3	Selyem András János	Dobó Katalin Gimnázium	Esztergom	Mikolai Lászlóné
4	Márton Péter	Aszódi Evangélikus Gimnázium	Aszód	Osgyániné Németh Márta
5	Oláh Attila	Karinthy Frigyes Gimnázium	Budapest	Oláh Júlianna
5	Ember Orsolya	Verseghy Ferenc Gimnázium	Szolnok	Pogányné Balázs Zsuzsanna
7	Kozma Márton	Szent István Gimnázium	Budapest	Borbás Réka
8	Kovács Máté Barnabás	Szent István Gimnázium	Budapest	Magyar László
9	Papp Ábrahám	Ciszterci Szent István Gimnázium	Székesfehérvár	Rideg Gabriella
10	Zeller Bálint	Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziuma	Pécs	dr. Petz Andrea, Mostbacher Éva
11	Orosz Máté	Békéscsabai Andrássy Gyula Gimnázium	Békéscsaba	Kovács Miklós
12	Szabó Renáta	Katona József Gimnázium	Kecskemét	Tóth Zsolt
13	Kern Dóra	Jedlik Ányos Gimnázium	Budapest	Elekné Becz Beatrix, Holczer József

Harmadik kategória

Helyezés	Név	Iskola	Város	Felkészítő tanár
1	Nagy Kristóf Márk	Vörösmarty Mihály Gimnázium	Érd	Versits Livia
2	Virágh Anna	Érdi Vörösmarty Mihály Gimnázium	Érd	Versits Livia
3	Gábor Gergő	Nyíregyházi Főiskola, Eötvös József Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium	Nyíregyháza	Sarka Lajos
4	Várda Ernák	Ciszterci Rend Nagy Lajos gimnáziuma és kollégiuma	Pécs	Mostbacher Éva, dr. Petz Andrea
5	Csik Noémi Zsófia	Debreceni Egyetem Kossuth Lajos Gyakorló Gimnáziuma	Debrecen	Kovácsné Malatinszky Márta
6	Farkas Borbála	ELTE Apáczai Csere János Gyakorló-gimnázium és Kollégium	Budapest	Villányi Attila
7	Kiss Mátyás	Katona József Gimnázium	Kecskemét	Sároné Jéga Szabó Irén
8	Csaba Márton	Premontrei Szent Norbert Gimnázium Egyházzenei Szakközépiskola és Diákotthon	Gödöllő	Szakmánné Rákoczi Melinda, Szakmány Csaba
9	Szabó Réka	Katona József Gimnázium	Kecskemét	Tóth Zsolt

Különdíjasok: A Magyar Kémikusok Egyesülete által felajánlott különdíjat *Schmelczér András* vehette át a szóbeli fordulóban nyújtott kiemelkedő teljesítményéért. A legkreatívabb témafel-

dolgozásért járó különdíjat *Oláh Attila* kapta meg, a legeredményesebb felkészítő tanárnak járó díjat pedig *Versits Livia* nyerte el.

Tóth Gábor és Molnár Dániel

TUDOMÁNYOS ÉLET ÉS K+F

Vegyipari mozaik

„Több közepes publikációnál értékeesebb egy kiemelkedő.” A kutatási eredmények nyílt hozzáféréseivel (Open Access) kapcsolatos feladatok és lehetőségek számbavétele, valamint a tudományértékelés szempontjainak áttekintése lesz az MTA közelmúltban meg-



alakult *Publikációs Elnöki Bizottságának* fő feladata. Az új akadémiai testület elnöke *Makara Gábor*, aki szerint a publikációs kérdésekkel ugyan minden tudományos osztály rendszeresen és behatóan foglalkozik, de az MTA egészét tekintve nincs átfogó kép. „Érdemes lenne közkinccsé tenni a különböző tudományterületek művelőinek tapasztalatait” – említett egyet-

a lehetséges feladatok közül *Makara Gábor*. Utalt rá, hogy az egyes tudományágak publikációs sajátosságai rendkívül eltérnek egymástól: „A fizikusok közleményeinél például találkozhatunk sok száz vagy akár ezerfős szerzői kollektívával is, míg a humán tudományokban leggyakrabban egyetlen kutató foglalja össze eredményeit. Más az értékrend, máshogy méri a teljesítményt.” Az akadémikus az eltéréseket számba véve arra is felhívta a figyelmet, hogy míg a humán tudományokban szinte az MTA doktora cím előfeltételének tartják a vaskos monográfiákat, addig a természettudományból akadémiai doktori címet szerzők közül sokak nevéhez egyetlen könyv megírása sem fűződik.

Makara Gábor szerint megérett az idő a tudományos eredmények értékelésének újragondolására. Ilyen idejélműlt elemnek nevezte például az impaktfaktor összeadását és az összegzés alapján történő értékelést. Bár ez korábban is csupán egy tényezője volt az értékelésnek, a Publikációs Elnöki Bizottság elnöke más indikáto-



rokkal váltaná fel az összegzett impaktfaktort. „A tudományban egy kiemelkedő eredményt elérő, arról először beszámoló kutatót kell értékelni. Több közepes publikációnál értékesebb egy kiemelkedő. A különböző színvonalú munkákból összeálló átlagból nem születik kiválóság.” Makara Gábor szerint a jövőben ezt a szemléletet az MTA doktora cím megszerzését megelőző eljárásban is egyre jobban érvényesítik majd. Mind nagyobb jelentősége lesz egy sokak által hivatkozott közleménynek. Hozzátette ugyanakkor: egy közel-múltban készített felmérés szerint az akadémiai doktorok teljesítményének elbírálása és a címre érdemesek kiválasztásának folyamata eddig sem volt rossz, de az impaktfaktor tekintetében szemléletváltásra van szükség.

„Forradalom zajlik” – summázta a tudományos kommunikációban az eredmények nyílt közzétételét eredményező változásokat Makara Gábor. Az Európai Bizottságnak az az irányelve, amely szerint minden közpénzből finanszírozott kutatás esetében lehetővé kell tenni a tudományos eredmények nyílt hozzáférését, egyszerű és helyes, a megvalósítása azonban sokszor problémákba ütközik. A tudományos cikkek esetében viszonylag könnyen megvalósítható az eredmények közzététele. A természettudományok területén a mindenki számára hozzáférhető publikációk aránya elérte az ötven százalékot. A tudományos világ egységes fellépésével, szemléletváltással és anyagi áldozatokkal ez az arány még tovább növelhető, 2020-ra talán a kilencven százalékot is elérheti. Makara Gábor inkább a könyvkiadásban lát nehézségeket. Egy kötet esetében ugyanis a nyílt közzététel olyan pénzügyi-gazdasági és jogi problémákat vethet fel, amelyek megoldása a közeljövőben nem várható.

Magyarországon a nyílt hozzáférést tudományos művek legfontosabb gyűjteménye, hiteles adatbázisa a Magyar Tudományos Művek Tára (MTMT). Az eredetileg 24 tagintézmény száma mostanra megduplázódott. Az akadémiai kutatóhálózat és a felsőoktatási intézmények tekintetében a lefedettség eléri a 95 százalékot. A 43 ezer kutató-szerző nevéhez köthető publikációk száma 1,4 millió, a hivatkozó közleményeké pedig 4,4 millió körülire tehető. Tavaly 182 ezer tétellel gyarapodott az adatbázis, a hivatkozások száma pedig 600 ezerrel. „Mindenki, aki aktív, és számít, az benne van” – érzékeltette az adatbázis jelentőségét az akadémikus. Hozzátette: az MTMT folyamatos fejlesztése jelentős feladat. Ez év szeptemberétől várhatóan új szoftverrel működik a rendszer. (mta.hu)



Kiszámíthatóság kell a k+f támogatások odaítélésében. Zökkenőmentes volt a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal januári indulása – nyilatkozta Pállinkás József Csákó Attilának, a Napi.hu munkatársának.



A kutatás-fejlesztésre és innovációra a mostani hétéves pénzügyi ciklusban 550 milliárd forint vissza nem térítendő és 200 milliárd visszafizetendő támogatás áll rendelkezésre. Az akadémikus komoly gondnak tartja, hogy az oktatásból sok helyen kiveszett az inspiráció és a követelményállítást egyensúly. Rövidesen Brüsszelhez fordulnak, mert a kutatói bérek tekintetében igazságtalannak tartják az Európai Kutatási Tanács kiválósági programjának kifizetési rendszerét.

– Januárban kezdte meg működését a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH). Hogy érzi, mennyire volt zökkenőmentes az indulás?

– A törvény alapján átvettük az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA), a Nemzeti Innovációs Hivatal (NIH) és a

korábbi Kutatási és Technológiai Innovációs Alap kezelőinek feladatait. Utóbbi elkülönített állami pénzalap, teljes kiadási főösszege 74,1 milliárd forint. Az új hivatal szervezete működőképes, megtörtént a munkatársak, köztük háromból két elnökhelyettes kinevezése. Nem volt olyan zökkenő a tevékenységünkben, amely zavarta volna a működést.

– Ön javasolta a kormánynak az NKFIH létrehozását. Miért gondolja, hogy a hivatal életre hívása hatékonyabb működést eredményez?

– Az igazi hatékonyságnövelés záloga az alapkutatások, az alkalmazott kutatások, valamint az innováció koordinált, szakpolitikai stratégiai alapú finanszírozása. Felszámolhatjuk a pályázati töredezettséget, a párhuzamosságokat, csökkenhet az adminisztráció. További pozitívum, hogy az inspiráló hazai kutatás-fejlesztési és innovációs környezet kialakításáért felelős NKFIH koordináltan működhet együtt külföldi partnerintézményekkel éppúgy, mint a magyar gazdasági stratégiáért felelős Nemzetgazdasági Minisztériummal, a külföldi befektetőkkel kapcsolatot kiépítő Külgazdasági és Külügyminisztériummal és a Nemzeti Befektetési Ügynökséggel.

– Számos kritikát is kapott a finanszírozási rendszer átalakítása miatt, hogy centralizálta a pénzek elosztását.

– Ennél több kritika már csak azt a kutatásfinanszírozási rendszert érte, amelyben a rendelkezésre álló forrásokat sokszor stratégia nélkül, pazarlóan használták fel, az ad hoc módon meghirdetett pályázatokkal a rendszer szétforgácsolódott, a sok bába között elveszett a gyerek. A koncentráltabb szakpolitikai felelősség kifejezetten előnyös a területre szánt források hatékony felhasználása érdekében.

– Vannak, akik szerint az alapkutatásokat preferálja, mások úgy vélik, az alkalmazott kutatásokat helyezi előtérbe. Melyik a fontosabb?

– Mindkettő. Ha egy országban nincs világszínvonalú alapkutatás, innováció sem lesz, ezért az egyensúly igen fontos a támogatások odaítélésben. Ha a hazai tudományos műhelyekben csak közepes vagy alacsony színvonalú alapkutatás folyik, a kutatók és a szakemberek a gazdasághoz vezető innovációs láncba sem tudnak majd eredeti ötletekkel bekapcsolódni, sőt még a mások által felfedezett csúcstechnológiát sem tudják megfelelően alkalmazni.

– Mikor írják ki a pályázatokat?

– Március és május között, de vannak pályázatok, amelyeket már kiírtunk. A nyolcmilliárd forint keretösszegű kutatási témapályázatok mellett célzottabb, az alapkutatásokat, az alkalmazott kutatásokat és az innovációt ötvöző programokat is indítunk.

– A pénzek hasznosulása hogyan mérhető? Egyáltalán mérhető?

– Eddig ezzel, sajnos, nem nagyon foglalkoztak. Az ellenőrzések során csak azt vizsgálták, szabályosan költötték-e a forrásokat, de arra nem jutott figyelem, célszerű volt-e a forrásfelhasználás, lette-e eredménye a támogatásnak. Mostantól a szubvenciók hasznosulását is elemezzük.

– Elképzelhető, hogy életképtelen vállalkozásokat támogatással tartanak életben?

– Az állami k-f-i támogatásnak nem lehet célja, hogy életképtelen vállalkozások működjenek. A vállalkozások egy-egy ígéretes ötlet kivitelezéséhez kaphatnak támogatást, de néhány év után a piacon kell megállniuk a helyüket. Pályázati programjainkkal a lehetséges pályázók szemléletét is formálni szeretnénk, hogy ne pénzre, hanem feladatra pályázzanak – ehhez kiszámítható, motiváló kutatásfinanszírozási környezet szükséges.

– Az adórendszerrel nem lehetne jobban preferálni a k-f-i tevékenységet?

– A társasági adóból jelenleg is kapható kedvezmény.

– A strukturális alapokból az elmúlt hét évben csak 8,5 száza-



lék jutott erre a területre, miközben a lengyelek 14, az észtek pedig 20 százalékot szereztek meg. Ebben az időszakban az uniós tagállamok közül Bulgárián és Horvátországon kívül csak nálunk nem nőttek a k-f-i támogatások. Hogyan növelhető a ráfordítás?

– A 2007–2014 közötti időszakban a strukturális alapokból valóban alacsony volt a k-f-i ráfordítás. A mostani hétéves pénzügyi ciklusban 550 milliárd forint vissza nem térítendő és 200 milliárd visszatérítendő támogatás áll rendelkezésre. Pályázati programjaink jelentős részében ezek kombinációját fogjuk meghirdetni. Egyidejűleg a hazai k-f-i ráfordításokat is folyamatosan növelni szükséges. A tervek szerint a jelenlegi 1,4 százalékról 2020-ra a GDP 1,8 százalékára kell emelni a ráfordítást. Szeretném, ha elérnénk a két százalékot.

– Mire alapozza optimizmusát?

– Világosan megfogalmazott, jó programok kellene és kiszámítható struktúra. Ha a döntéshozók és az adózók számára egyértelművé tesszük, hogy a k-f-i programok a valódi növekedés forrásai lehetnek, akkor erre adnak majd több pénzt. A gazdaságpolitikai és a k-f-i környezetet egyaránt alakítanunk kell, hogy a hazai és a külföldi befektetők egyaránt inspiratívnak és biztonságosnak érezzék. Nagyon fontos továbbá, hogy megfelelő számú és felkészültségű szakember legyen az országban.

– A döntéshozók sokszor azt mondják, akkor adok pénzt, ha a multik befektetnek, utóbbiak pedig azt, hogy majd akkor invesztálnak, ha a politika oldaláról is látják az elkötelezettséget.

– Éppen ahhoz kell ügyesség és szakértelem, hogy ez egyszerre történjen meg.

– Ezt a törekvést segíti vagy inkább támadásokra ad okot, hogy ön korábban politikus, kormánytag volt?

– Fontos, hogy az ember elkötelezett tudománypolitikus legyen. Komoly előny, hogy ismerem az államigazgatás működését, a szakpolitikásokat, a szakembereket, a tudomány és kutatás intézményrendszerének működését. Az, hogy a politikai nézeteim közismertek, alkalmat adhat támadásra azok részéről, akik mindenben pártpolitikát keresnek. A szakmaiság nagyon fontos; sem értelmiségi, sem politikai göggel nem lehet egy ilyen hivatalt vezetni.

– Említette, hogy megfelelő szakemberekre van szükség a k-f-i tevékenység fokozásához. Elégedett a magyarországi felsőoktatás színvonalával, szerkezetével?

– Ebben is egyensúlyra van szükség. A hazai oktatásban 1990-ben elkezdődött az eltolódás olyan szakmák, diplomák felé, amelyek azt az illúziót keltették: kevés intellektuális ráfordítással is lehet olyan papírt szerezni, amellyel megnyílik a világ és sok pénzt lehet keresni. Egyre nyilvánvalóbb, hogy ez csak illúzió, de ezt a folyamatot sajnos nehéz megfordítani, sok tennivalónk van még a felsőoktatás és a közoktatás színvonalának emeléséért. A legnagyobb gondnak azt látom, hogy az oktatásból sok helyen kiveszett az inspiráció és a követelményállítást egyensúly. A jól működő iskola-rendszerben a követelmények betartatása, a kreativitás ösztönzése elsődleges, de párosulnia kell a bizalommal és a partnerséggel.

– Mi a véleménye a duális képzésről?

– Ebben a kérdésben kellő óvatosságra intek mindenkit. Fontos megvizsgálni, hol milyen feltételekkel lehet perspektivikus.

– Mert...

– Ebben a képzési módban nem lehet például fejlesztőmérnököt oktatni. Esetükben az egyetem arra szolgál, hogy komoly matematikai, fizikai tudást szerezzenek, a gyakorlati ismeretek elsajátítására csak az egyetem elvégzése után kerülhet sor. Másfelől sokszor probléma, hogy a cégekhez kihelyezett fiatalok mellé nem sikerül megfelelő mentort találni, akik képesek és hajlandók ezekkel a fiatalokkal foglalkozni.

– Németországban, illetve a magyarországi külföldi cégeknél azért látni pozitív példákat.

– Valóban, de az is igaz, hogy a német rendszer hosszú távon megtervezett, részletesen kidolgozott koncepción alapul.

– A fizetős képzés a felsőoktatásban elfogadható az ön számára?

– Az állam bizonyos szakokon megrendelőként fizeti a képzési költséget, más területeken nem. Egy egészséges felsőoktatásban jelen kell lenniük magánforrásoknak is, ami kérdéses, az az állami és magánforrások aránya. Az egyik legfontosabb szempont, hogy a területi hátrányok vagy a jövedelmi aránytalanságok miatt ne legyen olyan tehetséges diák, aki nem jut be a rendszerbe.

– A lapok leosztása már a középiskolában megtörténik, hiszen az elmaradott térségben vagy szerényebb körülmények között élő diákok sokszor hendikeppel indulnak.

– Sajnos, valóban vannak olyan részei az országnak, ahol versenyhátránnyal indulnak a gyerekek. Nagy feladata a közoktatásnak, hogy a meglévő különbségeket megszüntesse.

– Hogyan és mivel lehet megállítani az agyelszívást? Néhány éve elindult az MTA keretében – az ön kezdeményezésére – a Lendület program. Tervez-e hasonlót az NKFIH?

– Szeretném, ha sok hasonlóan sikeres programunk lenne. Továbbá szeretnénk ösztönözni, hogy az Európai Kutatási Tanács (EKT) kiválósági programjában minél több magyar kutató vegyen részt. A támogatás jelentős, 1,5–2 millió euró. A kiválasztás két lépésben zajlik, és mindig vannak olyanok, akik a második lépésben is a támogatandók között szerepelnek, de nem kapnak pénzt, mert a kassza kiürült. Számukra szeretnék olyan programot indítani, amelyben egy évig – amíg az EKT pénzéből nem jutnak támogatáshoz – mi finanszírozzunk a működésüket, hogy ne essenek ki a kutatásból és lehetőleg Magyarországon maradjanak.

– Igaz az, hogy a nyertesek sem mindig maradnak Magyarországon?

– Ennek a pályázatnak számunkra az a hátránya, hogy bármelyik tagállamban felhasználható, s az összegből a projektnek helyet adó ország tudományos munkatársait megillető fizetés adható. Vagyis, ha a nyertes például Németországba viszi a projektet, sokkal több pénzt tud magának kifizetni bérre, mint ha hazánkban marad. Azt gondoljuk, ha valaki elnyerte a támogatást, hadd fizethessen magának az európai átlagnak megfelelő bért.

– Miért nem fordulnak panasszal Brüsszelhez?

– Megtettük, de elutasítottak. Rövidesen újra nekifutunk az egyeztetésnek, mert igazságtalannak és versenytorzítónak tartjuk ezt a szisztémát. (mta.hu–napi.hu)

Banai Endre összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Magyar Kémikusok Egyesülete Tisztújító Küldöttközgyűlés

2015. május 15. 10:00

Budapesti Fasori Evangélikus Gimnázium

1071 Budapest, Városligeti fasor, 17–21.

Megközelítés: az M1 földalatti Bajza utcai megállójától a Bajza utcán besétálva a Benczúr utca irányába a 3. keresztutca a Városligeti fasor.

A regisztráció 9:00-tól kezdődik.

A közgyűlési dokumentumok honlapunkról letölthetők. A küldötteket, szakosztályok, szakcsoportok, területi szervezetek, munkahelyi csoportok vezetőit és minden egyesületi tagtársunkat szeretettel várjuk.



Biztonságtechnika Továbbképző Szeminárium

2015. május 27–29.

Hotel Ramada, Balatonalmádi, Bajcsy-Zsilinszky u. 14.

Online regisztráció: <http://biztonsagtechnika.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kortvélyessy Eszter,
eszter.kortvelyessy@mke.org.hu

16th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry

– 16BDSHC

2015. június 14–17.

Hotel Ramada, Balatonalmádi, Bajcsy-Zsilinszky u. 14.

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.

Online jelentkezés:

<https://www.mke.org.hu/conferences/16bdshc/registration/>

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, info@16bdshc.hu

MKE 2. Nemzeti Konferencia

2015. augusztus 31. – szeptember 2.

Hotel Béke, Hajdúszoboszló

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.

Online jelentkezés: <http://www.mkenk2015.mke.org.hu/>

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kórispataky Panna, mkenk2015@mke.org.hu

5th European Drying Conference

2015. október 21–23.

Hotel Flamenco, Budapest, Tas vezér u. 1–3.

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.

Online jelentkezés: <http://www.eurodrying2015.mke.org.hu>

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kórispataky Panna, eurodrying2015@mke.org.hu

Rendezvénynaptár

2015. április 10–12.	9. Kémikus Diákszimpozium	Bonyhád
2015. április 16.	Magnézium Szimpózium	Budapest
2015. április 24–26.	XLVII. Irinyi János Kémiaverseny	Szeged
2015. május 27–29.	Biztonságtechnika Szeminárium	Balatonalmádi
2015. június 14–17.	16 th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry	Balatonalmádi
2015. augusztus 31. – szeptember 2.	MKE 2. Nemzeti Konferencia	Hajdúszoboszló
2015. szeptember 26.	Innováció a Természet- tudományban – Doktorandusz- Konferencia	Szeged
2015. október 7–9.	XII. Környezetvédelmi Ana- litikai és Technológiai Napok	
2015. október	Őszi Radiokémiai Napok	
2015. október 21–23.	5 th European Drying Conference	Budapest
2015. november	Kozmetikai Szimpózium	Budapest

Az MKE Intézőbizottság ülése

(2015. március)

1. Az Intézőbizottság (IB) megvitatta és IB-határozatban elfogadta a Nemzetközi Kapcsolatok Bizottsága elnökének, Farkas Etelkának a beszámolóját a bizottság 2014. évi tevékenységéről.

2. Az IB meghallgatta a KÖKÉL Szerkesztőbizottság elnökének, Magyarfalvi Gábornak a tájékoztatóját a Lap elmúlt egyéves tevékenységéről. Az IB elfogadta a beszámolót, egyben megköszönve a Szerkesztőség és minden közreműködő tevékenységét kérte, hogy hasonló szellemben és színvonalon folytassák a munkájukat.

3. Az MKE 2. Nemzeti Konferencia szervezése Simonné Sarkadi Livia tájékoztatása szerint rendben halad. Szalay Luca, a Kémia tanári Szakosztály elnöke felvetésére reagálva az IB megoldást fog keresni arra, hogy segítse közoktatásbeli kémia tanárok részvételét is a konferencián.

4. Simonné Sarkadi Livia értékelése szerint ismét sikeres és hasznos volt az egyesületi szervezetek vezetői számára 2015. március 20-án megtartott éves „vezetői értekezlet”.

5. Az Egyesület vezetése különböző csatornákon keresztül hívja fel a szakosztály/társaság, területi szervezet, munkahelyi csoportvezetők figyelmét arra, hogy az esedékes tisztújításnak legkésőbb 2015. április 30-ig tegyen eleget minden szervezet.

Az ülés emlékeztetője a www.mke.org.hu honlap „Az Egyesületről > Egyesületi élet > Jegyzőkönyvek” menüpontja alatt olvasható.

Kovács Attila

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXX. No. 5. May 2015

CONTENTS

<i>Cyclodextrins. From nanocontainers to therapeutic tools</i>	150
LAJOS SZENTE	
<i>Computational study of assembling chemical systems</i>	153
MILÁN SZŐRI, BALÁZS JÓJÁRT, BÉLA VISKOLCZ	
Albert Szent-Györgyi Lectures	
<i>A lecture series in molecular life sciences</i>	158
LÁSZLÓ NYITRAY, ANDRÁS PERCZEL, LÁSZLÓ BUDAY	
Reports on lectures	
<i>Understanding dynamic layers of cellular information transfer by Harald Schwalbe</i>	159
LÁSZLÓ NYITRAY	
<i>Structural insight into the mechanism of complement activation through a hybrid approach of crystallography and small angle X-ray scattering by Gregers Rom Andersen</i>	160
PÉTER GÁL	
<i>In the future, many talented young people may not enter universities. An interview with Professor László Lovász</i>	162
MARIE-ROSE MAKKI	
<i>Noted and Chemist. Pope Francis</i>	164
GÁBOR LENTE	
<i>Cloud poking. Molecular racism and allergy to synthetics</i>	165
DEZSŐ CSUPOR	
<i>Hungarian rivers are recovering after red mud disaster</i>	166
<i>An antimalarial drug research initiated by Chairman Mao. The discovery of artemisinin</i>	167
TIBOR BRAUN	
<i>Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)</i>	171
<i>Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)</i>	172
<i>The Society's Life</i>	174
<i>News of the Month</i>	175

Nem tűntem el

Dokumentum-játékfilm Richter Gedeonról

Sajtóvetítésen mutatták be március 13-án az Uránia Nemzeti Filmszínházban a Richter Gedeon életéről és munkásságáról készített dokumentum-játékfilmet. Az eseményen a Részvénytársaság vezérigazgatója, Bogsch Erik köszöntötte a résztvevőket és mondta el a film készítésének, megszületésének körülményeit, majd Beke Zsuzsa PR-vezető hangsúlyozta, hogy ez a film is a gyár hagyományörző és családias jellegének példája.

A vetítést megelőzően a film alkotói és készítői közül Spáh Dávid rendező, Rudolf Péter főszereplő, Seres Zoltán narrátor és Szőke Tibor producer vallott a filmre való felkészülés folyamatáról, Richter Gedeon személyes élettörténetén át a kor megismerésének megtapasztalásairól és a filmezés kapcsán nyert élményekről, feltörő érzésekről. A mintegy egyórás film a levéltárakban, múzeumokban, többek között a gyár saját múzeumában felkelhető dokumentumokra és játékfilmes betétekre támaszkodva eleveníti fel a közel 110 év történetét, annak is elsősorban a Richter Gedeon nevéhez fűződő első 40 évnek a történetét, ami alatt egy kis gyógyszerészeti műhely világhírű nagyipari gyárrá fejlődött a történelem nem mindenben támogató közegében. Richter Gedeon, aki szakmájában a mértéktartó realitások embere volt, a társadalmi viszonyok terén illúziókban ringatta magát. Az utolsó pillanatokig nem hitte el, hogy neki, a kormányfőtanácsosnak, aki létrehozta az ország egyik nagy ipari létesítményét, a nácizmus Magyarországon baja eshet. Ennek az áldozata lett, őt is a Dunába lőtték.



Örök életű mondata számomra, és ezt adnám tovább olvasóinknak – amikor a nyilasok kitiltották a gyárából, a következő szavakkal búcsúzott a munkatársaitól, a munkásoktól: „Ez itt valami, amit 40 évig építettem, úgyhogy vigyázzanak rá.” Sok mindent építettünk már ebben az országban, amire van okunk büszkének lenni, és mindenkor kötelességünk vigyázni rá.

A film a gyár dolgozói számára hamarosan bemutatásra kerül, a nagyközönség számára az interneten is hozzáférhető lesz. Amint erről többet tudunk, olvasóinkat tájékoztatjuk.

Kiss Tamás



Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy a

személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén 715 052 forintot

utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásait, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a XV. Országos Diákvegyész Napok, valamint a 2014-ben hatodszor megrendezett Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használtuk fel, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2014. évi SZJA bevallásakor – értékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező nyilatkozat kitöltésével.

Felhívjuk figyelmüket, hogy akinek a bevallás pillanatában adótartozása van, az elveszíti az 1% felajánlásának a lehetőségét!

Az MKE adószáma: 19815819-2-41

Terveink szerint 2015-ben az így befolyt összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a 9. Kémikus Diákszimpozium, valamint a 2015-ben hetszerverezendő Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használjuk fel.

Továbbra is céljaink közé tartozik, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő határon túli honfitársunkhoz.



Megérkezett a GC 2.0

A Thermo Scientific a felhasználói igények minél teljesebb kielégítése érdekében a **TRACE™ 1300**-as sorozatának tervezésénél teljesen megújította a gázkromatográfok műszaki kialakításának alapelveit. A moduláris felépítés, a kezelő által gyorsan cserélhető injektorok és detektorok, a szabadalmaztatott héliumtakarékosági megoldás és a **könnyen kezelhető Chromeleon™ szoftver** révén a Trace™ 1300 GC minden eddiginél egyszerűbb, olcsóbb és hatékonyabb üzemeltetést tesz lehetővé.

... gázkromatográfia új műszaki alapokon

• további információ: www.thermoscientific.com/trace1300



Trace 1300 GC

- Felhasználó által gyorsan csatlakoztatható injektor és detektor modulok
- Gyors, nagyérzékenységű detektorok
- Rendkívül gyors átkonfigurálhatóság



A felhasználó által csatlakoztatható modul behelyezése



Thermo Scientific™ Dionex™ Chromeleon™
kromatográfias vezérlő- és adatfeldolgozó szoftver



A helium fogyasztás drasztikus csökkentése
a Thermo Scientific Instant Connect
Helium Saver™ technológiával,
a mérési módszerek megváltoztatása nélkül

Thermo
SCIENTIFIC

Kizárólagos képviselet:

UNICAM Magyarország Kft., 1144 Budapest, Kőszeg utca 27.

Telefon: +36 1 221 5536 • Fax: +36 1 221 5543

E-mail: unicam@unicam.hu • Web: www.unicam.hu

20 éves

UNICAM

Magyarország Kft.